

Strukturverfeinerung von Siliziumkarbid-Polytypen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Physikalisch-Astronomischen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Diplomphysiker Andreas Bauer
geboren am 17. November 1968 in Schweinfurt

Gutachter:

1. Prof. Dr. K. Goetz (Friedrich-Schiller-Universität Jena)
2. Prof. Dr. F. Bechstedt (Friedrich-Schiller-Universität Jena)
3. Prof. Dr. H.-R. Höche (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg)

Tag des der letzten Rigorosumsprüfung: 25. September 2003

Tag der öffentlichen Verteidigung: 20. November 2003

à Maurice

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Siliziumkarbid	3
2.1	Materialeigenschaften des Halbleiters Siliziumkarbid	3
2.2	Herstellung von Siliziumkarbid	4
2.3	Kristallstruktur von Siliziumkarbid	5
2.3.1	Polytypie	5
2.3.2	Siliziumkarbid-Polytypen	6
2.3.2.1	Bezeichnungen der Siliziumkarbid Polytypen	6
2.3.2.2	Ursache der Polytypie bei Siliziumkarbid	7
2.3.2.3	Kristallographische Beschreibung der Siliziumkarbid-Polytypen	8
3	Strukturverfeinerung von 4H- und 6H-SiC:	11
3.1	Atomare Relaxationen	11
3.2	Bekannte Relaxationsmodelle	13
3.2.1	Theoretische Relaxationsmodelle aus <i>ab-initio</i> Rechnungen	13
3.2.1.1	Relaxationsmodell nach CHENG	13
3.2.1.2	Relaxationsmodell nach KÄCKELL	14
3.2.2	Relaxationsmodelle auf der Basis von Röntgenbeugungsexperimenten	15
3.2.2.1	Strukturverfeinerungsmodell nach GOMES DE MESQUITA	15
3.2.2.2	Strukturverfeinerungsmodell nach KUSCHNERUS	16
3.2.3	Folgerungen aus den vorhandenen Strukturmodellen	17
3.3	Strukturverfeinerung mit „fastverbotenen“ Reflexen	17
3.3.1	„Fastverbotene“ Reflexe	17
3.3.2	Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe	20
3.3.2.1	4H-SiC	20
3.3.2.2	6H-SiC	23

3.4	Einfluss der Temperaturfaktoren	28
4	<i>Eindeutige Bestimmung der Verfeinerungsparameter</i>	31
4.1	Mehrdeutigkeiten	31
4.2	Mehrstrahlfälle	33
4.2.1	Einführung	33
4.2.2	Azimutale Position der Mehrstrahlfälle	36
4.2.3	Intensitätsverlauf nach SHEN	40
5	<i>Experimenteller Aufbau</i>	45
5.1	Drehanode mit 4-Kreisgoniometer D5000	45
5.2	ROBL-Beamline an der European Synchrotron Radiation Facility in Grenoble	47
5.3	Bond Apparatur JARD	48
6	<i>Experimentelle Ergebnisse</i>	50
6.1	4H-SiC	50
6.1.1	Bestimmung der Strukturfaktoren	50
6.1.1.1	Drehanode	50
6.1.1.2	Synchrotron	52
6.1.2	Bestimmung der Relaxationsparameter	54
6.1.3	Eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter	59
6.1.4	Fehlerabschätzung	60
6.2	6H-SiC	62
6.2.1	Bestimmung der Strukturfaktoren	62
6.2.1.1	Drehanode	62
6.2.1.2	Synchrotron	63
6.2.2	Bestimmung der Relaxationsparameter	64
6.2.3	Eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter	68
6.2.4	Fehlerabschätzung	69
6.3	Gitterparameter von 15R- und 21R-SiC	70
7	<i>Diskussion der Ergebnisse</i>	71
7.1	Gitterkonstanten	71
7.2	Relaxationsparameter	78
7.3	Modell eines modularen Aufbaus	82
8	<i>Zusammenfassung</i>	90

Inhaltsverzeichnis	VI
Literatur	92
Eigene Veröffentlichungen	100
Anhang	i
A Grundbegriffe der Röntgenbeugung	i
A.1 BRAGG- und LAUE-Gleichung	i
A.2 Strukturfaktor	ii
A.3 Integralintensität nach der kinematischen Theorie	iii
B Ausgewählte Formeln	v
B.1 Umrechnung zwischen dem kubischen und dem hexagonalen Kristallsystem	v
B.2 Netzebenenabstand hexagonal	vi
B.3 Winkel zwischen zwei Netzebenen (hexagonal)	vi
C Atomformfaktoren und Dispersionskorrekturen	vi
C.1 Analytische Näherung der Atomformfaktoren	vi
C.2 Dispersionskorrekturen	vii
D Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe	viii
D.1 Herleitung von (3.5) für 4H-SiC	viii
D.2 Herleitung von (3.13) und (3.20) für 6H-SiC	ix
D.3 Strukturfaktoren unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen für 4H-SiC	xi
D.4 Strukturfaktoren unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen für 6H-SiC	xi
D.5 Strukturfaktoren von 6H-SiC unter Berücksichtigung verschiedener Temperaturfaktoren innerhalb der Elementarzelle	xiv
E Lösung der Gleichungssysteme	xvi
Verzeichnis der Symbole, Konstanten und Abkürzungen	xx
A Symbole	xx
B Konstanten	xxvi
C Abkürzungen	xxvi
Abbildungsverzeichnis	xxvii
Tabellenverzeichnis	xxx
Danksagung	xxxi
Ehrenwörtliche Erklärung	xxxv
Lebenslauf	xxxvi

1 Einführung

Siliziumkarbid (SiC) beschäftigt mit seinen kristallographischen, optischen und elektrischen Eigenschaften schon über hundert Jahre die Wissenschaft. Die erste Synthese gelang dem schwedischen Chemiker J. J. BERCELIUS zufällig im Jahre 1824 bei dem Versuch Silizium herzustellen (BERCELIUS (1824)). Die erste Anwendung erhielt synthetisches Siliziumkarbid durch E. G. ACHESON – er bezeichnete es als *Carburundum* – in den neunziger Jahren des vorletzten Jahrhunderts aufgrund seiner großen Härte als Schleifmittel (ACHESON (1892)). In der Natur tritt Siliziumkarbid nur sehr selten auf. Erstmals nachgewiesen wurde natürliches Siliziumkarbid 1905 von H. MOISSAN in einem Meteoriten, der im Diablo-Krater in Arizona gefunden wurde (MOISSAN (1905)). Natürlich vorkommendes Siliziumkarbid wird als *Moissanit* bezeichnet. Die kristallographische Struktur von Siliziumkarbid wurde für β -SiC von A. W. HULL (HULL (1919, 1920)) und für α -SiC von H. OTT (OTT (1925, 1925a)) in den ersten Dekaden des vorigen Jahrhunderts aufgeklärt.

Im weiteren Verlauf blieb Siliziumkarbid aus zwei Gründen interessant. Zum einen ist es das Paradebeispiel der Polytypie und zum anderen ein Halbleitermaterial mit großer Bandlücke. Als erstes elektronisches Bauteil aus Siliziumkarbid wurde 1907 eine Lumineszenzdiode (LED) hergestellt (ROUND (1907)). Aber erst in den letzten zwanzig Jahren erlebte Siliziumkarbid aufgrund seiner herausragenden Eigenschaften als Halbleitermaterial seinen Durchbruch. Die physikalischen und elektrischen Eigenschaften von Siliziumkarbid erlauben die Herstellung von Bauelementen für höhere Temperaturen und höhere Leistungen, als dies mit den klassischen Halbleitermaterialien Silizium (Si) und Galliumarsenid (GaAs) möglich ist. Zu diesen Eigenschaften zählen u.a. der große Bandabstand, die hohe Durchbruchfeldstärke und die hohe thermische Leitfähigkeit. Die hohe Elektronensättigungsgeschwindigkeit prädestiniert Siliziumkarbid für den Verwendung bei Hochleistungs- und Hochfrequenzbauelementen. Auch besitzt Siliziumkarbid eine hohe chemische Widerstandsfähigkeit und ist strahlungsresistent (PENSL & HELBIG (1990), MORKOÇ *et al.* (1994)).

Der andere interessante Aspekt ist das Auftreten von Siliziumkarbid in vielen unterschiedlichen Modifikationen, sog. Polytypen. Die verschiedenen Polytypen unterscheiden sich allein darin, dass Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen in einer der drei Raumrichtungen verschieden

gestapelt werden. Zur Zeit sind über 200 Polytypen bekannt, und laufend werden weitere „entdeckt“ (SHAFFER (1969), JEPPE & PAGE (1983), YANG *et al.* (1999)). Die Ursache der Polytypie ist noch weitgehend ungeklärt. Obwohl schon einige Erklärungsversuche vorhanden sind, ist eine umfassende Lösung des Problems noch nicht in Sicht.

Die vorliegende Arbeit soll einen Beitrag zu dieser Problematik aus kristallographischer Sicht leisten. Die einzelnen Polytypen unterscheiden sich zum einen in ihren Gitterparametern a und c , zum anderen befinden sich die Atome in der Elementarzelle nicht auf ihren idealen Positionen, sondern weichen ein wenig von diesen ab. Solche Abweichungen werden als atomare Relaxationen bezeichnet. In dieser Arbeit wurden mittels röntgenographischer Untersuchungen die Unterschiede der Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$ bezüglich ihrer Gitterparameter bestimmt. Bei den Polytypen $4H$ und $6H$ wurde zusätzlich eine Strukturverfeinerung mit „fastverbotenen“ Reflexen zur Bestimmung der Relaxationsparameter durchgeführt. Aus den Ergebnissen wurde ein Modell zum inneren Aufbau der Elementarzellen von Siliziumkarbidpolytypen entworfen.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 werden das Halbleitermaterial Siliziumkarbid und seine Eigenschaften behandelt. Einige Verfahren zu Herstellung von Siliziumkarbid werden vorgestellt, der meiste Raum wird aber der Polytypie und der kristallographischen Beschreibung einiger ausgewählter Polytypen gewidmet. Im darauffolgenden Kapitel wird die Methode der „fastverbotenen“ Reflexe vorgestellt. Das vierte Kapitel befasst sich mit der eindeutigen Bestimmung der Relaxationsparameter mittels Mehrstrahlfällen. Im fünften Kapitel werden die im Rahmen dieser Arbeit benutzten experimentellen Aufbauten vorgestellt. Das sechste Kapitel befasst sich mit den experimentellen Ergebnissen, die im nachfolgenden siebten Kapitel diskutiert werden. Anschließend folgt noch eine Zusammenfassung dieser Arbeit.

2 Siliziumkarbid

In diesem Kapitel werden einige grundlegende Materialeigenschaften von Siliziumkarbid vorgestellt, weiterhin wird auf einige wichtige Verfahren zur Herstellung dieses Halbleiters eingegangen. Besonderen Raum wird der für Siliziumkarbid charakteristischen Polytypie, sowie der Beschreibung einiger wichtiger Siliziumkarbid-Polytypen gewidmet.

2.1 Materialeigenschaften des Halbleiters Siliziumkarbid

Die unterschiedlichen Polytypen von Siliziumkarbid besitzen verschiedene Materialeigenschaften, so steigt z.B. die Bandlücke mit wachsendem hexagonalen Anteil von der rein kubischen 3C- bis zu der rein hexagonalen 2H-Modifikation an. Die unterschiedlichen elektrischen Eigenschaften der einzelnen Polytypen des indirekten Halbleiters Siliziumkarbid haben ihren Ursprung in der von Polytyp zu Polytyp variierenden Bandstruktur. In Tab. 2.1 sind einige Eigenschaften der Polytypen 3C, 4H, 6H und 15R zusammengestellt. Allen Polytypen gemein ist die hohe Wärmeleitfähigkeit, sowie die extreme Härte.

Tab. 2.1: Materialparameter einiger SiC-Polytypen. Die Daten sind, wenn nicht anders angegeben, HARRIS (1995) entnommen.

Polytyp		3C	4H	6H	15R
Bandlücke (0 K) [eV]		2.42 ^a	3.28	3.08	2.99
Durchbruchfeldstärke [MVm ⁻¹] (Dotierkonz. 2.0·10 ¹⁵ cm ⁻³)		75 ^b	300 ^c	100 ^b	—
Wärmeleitfähigkeit [Wcm ⁻¹ K ⁻¹]		4.9			
Dichte [gcm ⁻³]		3.21			
relative Dielektrizitätskonstante (300 K)	⊥ c	9.72	9.76	9.66	9.72
	c	9.72	10.32	10.03	10.10

^a CLEMEN *et al.* (1992)
^b BHATNAGER & BALIGA (1993)
^c AUGUSTINE *et al.* (1997)

2.2 Herstellung von Siliziumkarbid

In den folgenden Abschnitten werden einige Verfahren zur Gewinnung von Siliziumkarbidvolumenkristallen und zur Abscheidung von dünnen Schichten auf Siliziumkarbid vorgestellt. Im Gegensatz zu anderen Halbleitermaterialien, wie z.B. Silizium, besitzt Siliziumkarbid bei Normaldruck keine flüssige Phase, so dass eine Züchtung aus der Schmelze nicht möglich ist. Bei höheren Temperaturen, ab ca. 2000 °C, setzt Sublimation ein.

J. A. LELY entwickelt in den fünfziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts ein Sublimationsverfahren zur Züchtung von SiC-Einkristallen (LELY (1955)). Dabei wird ein Graphittiegel mit SiC-Pulver oder einem Gemisch aus Silizium- und Graphitpulver so gefüllt, dass in der Mitte ein zylindrischer Hohlraum bleibt. Der gefüllte Tiegel wird in einer Schutzgasatmosphäre für mehrere Stunden auf eine Temperatur von etwa 2500 °C erhitzt. Die Stirnflächen des Tiegels bleiben etwa 20 °C kälter. Die Tiegelfüllung sublimiert und schlägt sich an den kühleren Stellen nieder. Durch spontane Keimbildung entstehen dabei größere Einkristalle. Diese Kristalle sind in der Regel auf Grund des im Restgas enthaltenen Stickstoffs n-dotiert. Nachteil dieses Verfahrens ist die geringe Ausbeute an Kristallen einer verwertbaren Größe.

Ein Verfahren zur Herstellung von größeren Siliziumkarbidkristallen ist das sogenannte „modifizierte LELY-Verfahren“ (ZIEGLER *et al.* (1983)), welches auf Arbeiten von TAIROV und TSVETKOV (TAIROV & TSVETKOV (1978)) basiert. Das ursprüngliche LELY-Verfahren wurde in der Weise modifiziert, dass hier ein Siliziumkarbid-Keimkristall vorgegeben wird, der sich am Boden oder an der Decke des Tiegels befindet. Als Ausgangsmaterial dient aus hochreinem Silizium und Graphit synthetisiertes SiC-Granulat. Die Kristallzüchtung findet bei 2200 °C – 2500 °C statt. Durch Einstellung eines geeigneten Temperaturgradienten wird das SiC-Ausgangsmaterial sublimiert und an dem kälteren Saatkristall wieder abgeschieden. Bei diesem Verfahren ist es möglich, den Polytyp des zu züchtenden Kristalls gezielt vorzugeben (STEIN *et al.* (1988)). Dieses Herstellungsverfahren von SiC-Einkristallen liefert kommerzielle Scheiben von Halbleiterqualität.

Ein wichtiges Verfahren zur Erzeugung von hochreinen Siliziumkarbidschichten ist die Gasphasenepitaxie (*Chemical-Vapour-Deposition* – CVD) (KARMANN (1992), ROTTNER (1994), KORDINA *et al.* (1997), RUPP *et al.* (1998)). Bei diesem Verfahren werden silizium- und kohlenstoffhaltige Gase mittels Trägergasstrom in einem Quarzglasrohr über ein SiC-Substrat geleitet. Das Substrat befindet sich auf einem RF-beheizten Suszeptor, der auf eine Temperatur von 1400 °C – 1800 °C gebracht wird. Bei geeigneten Züchtungsparametern reagieren die Si- und die C-Atome aus der Gasphase miteinander und es kommt zur Abscheidung von einkristallinem SiC auf der Substratoberfläche. Die Schichtwachstumsgeschwindigkeit beim CVD-Verfahren liegt bei wenigen Mikrometern in der Stunde.

Eine weitere Möglichkeit dünne Siliziumkarbidschichten abzuscheiden, bietet die Flüssigphasenepitaxie (*Liquid-Phase-Epitaxy* – LPE) (BRANDER & SUTTUON (1969), SUZUKI *et al.*

(1976), KÜRZINGER (1977), ZIEGLER (1981), BAUER (1995), SYVÄJÄRVI *et al.* (1999)). Bei diesem Verfahren scheidet sich eine Epitaxieschicht aus einer nichtstöchiometrischen mit Kohlenstoff übersättigten Siliziumschmelze bei ca. 1500 °C auf einen SiC-Substratkristall ab. Die Schichtwachstumsraten liegen bei diesem Verfahren im Bereich von wenigen Mikrometern in der Stunde. Ein Vorteil dieses Verfahrens liegt in der leichten Zuführbarkeit von festen Dotierstoffen in die Siliziumschmelze.

Bei der Molekularstrahlepitaxie (*Molecular-Beam-Epitaxy* – MBE) werden Silizium und Kohlenstoff oder silizium- und kohlenstoffhaltige Moleküle direkt als Teilchenstrahl im Ultrahochvakuum auf ein beheiztes Substrat abgeschieden (SCHMITT (1998)). Mit diesem Verfahren können wenige Nanometer dicke Schichten und auch abrupte pn-Übergänge hergestellt werden. Auch Heterostrukturen von verschiedenen SiC-Polytypen können mit diesem Verfahren realisiert werden (FISSEL *et al.* (1999, 2000)).

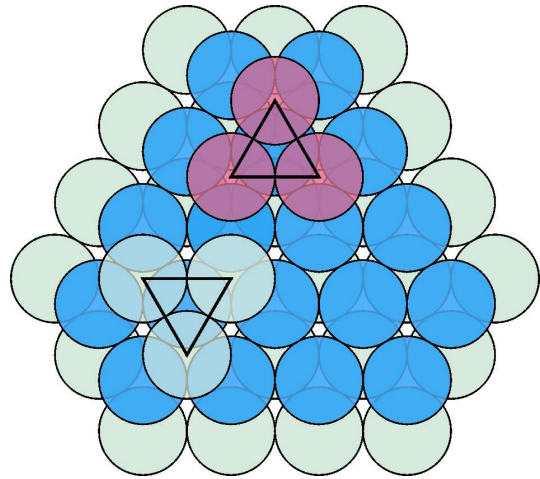
2.3 Kristallstruktur von Siliziumkarbid

2.3.1 Polytypie

Polytypie ist ein Spezialfall der Polymorphie. Polymorphie bedeutet, dass eine chemische Substanz in mehr als einer Struktur kristallisiert (VERMA & KRISHNA (1966)). Die chemischen und physikalischen Eigenschaften der einzelnen Polymorphe einer Substanz können sehr verschieden sein. Ein Beispiel für Polymorphie ist Kohlenstoff, der sowohl als Graphit, als auch als Diamant auftritt. Polytypie bedeutet die Einschränkung der Polymorphie auf eine Richtung (SCHNEER (1955)), d.h. die Einheitszelle von Polytypen einer Substanz unterscheidet sich in zwei Dimensionen nicht, während die dritte Dimension von der Stapelfolge abhängt, wobei die Länge der Elementarzelle in dieser Richtung ein ganzzahliges Vielfaches einer für alle Polytypen gemeinsamen Basiseinheit ist. Verschiedene Polytypen können auf Grund ihrer unterschiedlichen Stapelfolge andere Kristallgitter besitzen und sich in ihrer Raumgruppe unterscheiden. Obwohl Polytypie auch bei anderen Substanzen, wie z.B. Zinksulfid (ZnS), Cadmiumiodid (CdI₂) oder Bleiiodid (PbI₂) auftritt (PANDEY & KRISHNA (1983), YEH *et al.* (1992)), ist SiC das klassische Beispiel für dieses Phänomen (BAUMHAUER (1912, 1915)).

Die Polytypie kann mit dem Modell der dichtesten Kugelpackung beschrieben werden. Dazu stellt man sich zuerst eine Lage von dichtgepackten Kugeln vor, die als Lage *A* bezeichnet werden soll. Jede Kugel berührt sechs weitere Kugeln, die sie umgeben. In dieser Lage gibt es zwei Arten von dreieckigen Lücken, solche die aufwärts gerichtet sind und solche, deren Spitze nach unten zeigt (Abb. 2.1). Wird auf die eine Art von Lücken dieser Lage eine zweite Lage Kugeln gestapelt (Lage *B*), gibt es für eine dritte Lage zwei Möglichkeiten. Sie könnte genau über der Lage *A* liegen, die Stapelfolge dieser drei Lagen wäre *ABA*. Eine Wiederholung dieser Stapelfolge, also *ABABAB*... entspräche einem BRAVAIS-Gitter mit hexagonaler Symmetrie.

Abb. 2.1: Erklärung der Stapelfolgen anhand des Modells der dichtesten Kugelpackungen. Die unterste Lage (grün) sei *A*. Auf den Lücken dieser Lage liegt die Schicht *B* (blau). Für die dritte Lage gibt es zwei Möglichkeiten: Die Lage kann genau auf der ersten liegen, also wiederum *A* (grün, unteres Dreieck) oder sie liegt auf den verbleibenden Lücken der ersten Schicht *C* (rot, oberes Dreieck)



Die zweite Möglichkeit ergibt sich durch Stapelung einer dritten Lage, die über den Lücken der Lage *A*, die nicht von der Lage *B* besetzt sind, liegt. Diese Lage soll *C* genannt werden, die Stapelfolge wäre nun *ABC*. In diesem Fall ergäbe sich bei Wiederholung dieser Stapelfolge *ABCABCABC...*, was einem kubisch flächenzentrierten (*fcc*) BRAVAIS-Gitter entspricht. Außer diesen zwei Grenzfällen lassen sich mit dem Modell der dichtesten Kugelpackung beliebig viele Mischformen konstruieren, so wäre *ABCBCA...* eine Mischung aus zwei kubischen mit einer hexagonalen Lage.

2.3.2 Siliziumkarbid-Polytypen

Alle SiC-Polytypen lassen sich mit dem oben genannten Modell beschreiben. Bei SiC bilden die Si-Atome eine dichteste Kugelpackung, während die C-Atome die Hälfte der Tetraederlücken so besetzen, dass jedes Si-Atom tetraedrisch von vier C-Atomen umgeben ist und umgekehrt. Dies bedeutet, dass die Kugeln im Modell nicht mit den Atomen der jeweiligen Polytypen verwechselt werden dürfen, sondern die Lagen *A*, *B* oder *C* repräsentieren jeweils eine Silizium-Kohlenstoff-Doppellage.

2.3.2.1 Bezeichnungen der Siliziumkarbid Polytypen

Für die Beschreibung der Siliziumkarbid-Polytypen existieren unterschiedliche Notationen. Der kubische Polytyp wird auch als β -SiC bezeichnet, alle anderen Polytypen unter α -SiC zusammengefasst. Die gebräuchlichste Notation, die auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wird, geht auf RAMSDELL (RAMSDELL (1947)) zurück. Bei dieser Notation besteht die Bezeichnung eines Polytyps aus einer Zahl, welche die Anzahl der Silizium-Kohlenstoff-Doppelschichten einer Stapelperiode angibt und einem Buchstaben, der den Typ der Kristallstruktur bezeichnet; so steht *H* für hexagonal, *R* für rhomboedrisch und *C* für kubisch. Diese Bezeichnung ist jedoch nicht eindeutig, z.B. liese sich sowohl die Stapelfolge *ABCACB* als auch die Stapelfolge *ABCBAB* als $6H$ klassifizieren. Zur Unterscheidung wird ein Index hinzugefügt ($6H_a$, $6H_b$).

Tab. 2.2: Notationen zur Beschreibung der Siliziumkarbid-Polytypen 3C, 4H, 6H und 15R nach RAMSDELL, JAGODZINSKI, HÄGG und ZHDANOV, sowie deren Stapelfolge.

RAMSDELL	JAGODZINSKI	HÄGG	ZHDANOV	Stapelfolge
3C	<i>k</i>	+	∞	ABC
4H	<i>khkh</i>	++--	22	ABAC
6H	<i>hkhkhk</i>	+++---	33	ABCACB
15R	<i>(khhkh)</i> ₃	<i>(++---)</i> ₃	<i>(23)</i> ₃	ABCACBCABACBCB

Die *h*, *k* Notation nach JAGODZINSKI (JAGODZINSKI (1949)) beschreibt alternative sukzessive Rotationen um 0° bzw. 180° einer Lage in Bezug zu seinen Nachbarlagen, z.B. wird die Lage *A* in der Stapelfolge *BAB* als *h*, in der Anordnung *BAC*, oder *CAB* als *k* bezeichnet. Dies ist gleichbedeutend damit, dass Lagen in hexagonaler Umgebung mit *h* und Lagen in kubischer Umgebung mit *k* bezeichnet werden. Die Notation nach HÄGG (HÄGG (1943)) bezeichnet Übergänge von *A*→*B*, *B*→*C*, *C*→*A* mit + und Übergänge von *A*→*C*, *C*→*B*, *B*→*A* mit –. ZHDANOVs Notation (ZHDANOV & MINERVINA (1945)) besteht aus einer Zahlenfolge, die jeweils die kubisch gestapelten Doppelschichten bis zur nächsten hexagonalen Doppelschicht zählt, von dort an beginnt diese Zählweise wieder von vorne und wird als nächste Ziffer angehängt. 3C-SiC hätte demnach die Bezeichnung ∞ , 2H-SiC 11. In Tab. 2.2 sind die verschiedenen Notationen gegenübergestellt. Eine ausführliche Behandlung der unterschiedlichen Siliziumkarbid-Notationen findet sich in VERMA & KRISHNA (1966).

2.3.2.2 Ursache der Polytypie bei Siliziumkarbid

Die Ursache der Polytypie ist noch weitgehend ungeklärt, jedoch existieren einige Erklärungsversuche. FRANKS Theorie (FRANK (1949, 1951)) basiert auf Schraubenversetzungen beim Kristallwachstum. MITCHELL (MITCHELL (1957)) versuchte das Nichtauftreten von bestimmten möglichen Stapelfolgen zu erklären, indem er die drei Polytypen 4H, 6H und 15R als Basis annahm, aus denen alle anderen Polytypen aufgebaut werden können. Eine Weiterführung dieses Modells wurde von PANDEY & KRISHNA (PANDEY & KRISHNA (1975, 1978)) vorgenommen. JAGODZINSKI (JAGODZINSKI (1954, 1954a)) entwickelte ein thermodynamisches Modell zur Erklärung der Polytypie bei SiC, in dem 3C-SiC die Modifikation der höchsten Stabilität ist. Alle anderen Polytypen werden durch Verschiebungen von Doppellagen, verursacht durch Stufenversetzungen, senkrecht zur [0001]-Richtung gebildet. Neuere Arbeiten basieren auf dem sogenannten *Axial Next-Nearest Neighbour Ising* (ANNNI) Modell (BOEHM & BAK (1979), PRICE & YEOMANS (1984), CHENG *et al.* (1988), LIMPIJUMNONG & LAMBRECHT (1998)). Grundlage dieses Modells ist das aus der statistischen Physik bekannte ISING-Modell (ISING (1925)). Eine vollständige Erklärung des Auftretens der vielen Siliziumkarbid-Polytypen vermag keine dieser Theorien zu leisten.

2.3.2.3 Kristallographische Beschreibung der Siliziumkarbid-Polytypen

Im folgenden werden die innere Struktur der in dieser Arbeit behandelten Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$, sowie die zwei einfachsten Siliziumkarbidstrukturen $3C$ und $2H$ beschrieben. Abb. 2.2 zeigt einen Schnitt durch die Elementarzellen sowie die Stapelfolge der eben genannten Polytypen. Der kubische Polytyp $3C$ besitzt Zinkblendestruktur, die Silizium- sowie die Kohlenstoffatome bilden jeweils ein kubisch-flächenzentriertes (fcc) BRAVAIS-Gitter. Die zwei Gitter sind um ein Viertel der Raumdiagonalen gegeneinander verschoben. Die Siliziumatome sind ideal tetraedrisch von vier Kohlenstoffatomen umgeben und umgekehrt. Entsprechend der Raumgruppe $F\bar{4}3m$ (T_d^2 , Internationale Tabellen^a: № 216) liegen die Siliziumatome auf den Koordinaten $(0, 0, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ und $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, die Kohlenstoffatome auf den Koordinaten $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ und $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ in Einheiten der kubischen $3C$ -SiC Gitterkonstanten $a_{3C(k)}$. Jede Elementarzelle enthält somit vier Silizium- sowie vier Kohlenstoffatome. Bei der in Abb. 2.2 gezeigten $3C$ -Zelle in hexagonalen Koordinaten fällt die kubische $[111]$ -Richtung mit der hexagonalen $[0001]$ -Richtung zusammen^b.

Die hexagonalen Polytypen genügen Operationen der Raumgruppe $P6_3mc$ (C_{6v}^4 , Internationale Tabellen: № 186), falls die Stapelperiode gerade ist, oder der Raumgruppe $P3m1$ (C_{3v}^1 , № 156) für ungerade Stapelperioden. Nur der Polytyp $2H$ besteht ausschließlich aus Doppellagen mit hexagonaler Umgebung (Wurzitstruktur). Alle anderen hexagonalen Polytypen sind Mischungen aus hexagonalen und kubischen Doppellagen. So wechseln sich beim Polytyp $4H$ die kubischen und die hexagonalen Doppellagen ab, bei $6H$ -SiC folgen auf eine hexagonale zwei kubische Doppellagen. Im Einklang mit dieser Raumgruppe sind die Positionen der Atome senkrecht zur c -Achse festgelegt, parallel zu dieser Richtung sind die Positionen frei wählbar. Dies bedeutet, dass die Bindungstetraeder in Richtung der c -Achse gestaucht oder gestreckt sein können, also Abweichungen von der idealen Struktur auftreten können, sogenannte atomare Relaxationen. Weiterhin ergibt sich aus den Symmetrioperationen dieser Raumgruppe eine Äquivalenz der oberen Hälfte mit der unteren Hälfte der Elementarzelle. Wählt man die 6_3 -Achse als c -Achse (wie in Abb. 2.2 gezeigt), befinden sich die Atome der hexagonalen Polytypen in der unteren Hälfte der Elementarzelle auf folgenden Positionen:

$$(0, 0, \xi_1(X)), \quad (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \xi_2(X)), \quad (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \xi_3(X)), \quad (2.1)$$

wobei die erste Position die spezielle Punktlage a (WYCKOFF-Letter) obiger Raumgruppe mit der Punktsymmetrie $3m$ bezeichnet, die zwei weiteren die spezielle Punktlage b derselben Punktsymmetrie (WYCKOFF (1963)). X steht für Silizium oder Kohlenstoff. Die erste Position entspricht in Abb. 2.2 der Stapellage A , die zweite B und die dritte C . Äquivalent zu diesen Positionen sind folgende Positionen in der oberen Hälfte der Zelle:

$$(0, 0, \frac{1}{2} + \xi_1(X)), \quad (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + \xi_2(X)), \quad (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} + \xi_3(X)). \quad (2.2)$$

^a International Tables for Crystallography, Vol. A

^b Eine Umrechnung zwischen dem kubischen und dem hexagonalen Koordinatensystem findet sich in Anhang B1.

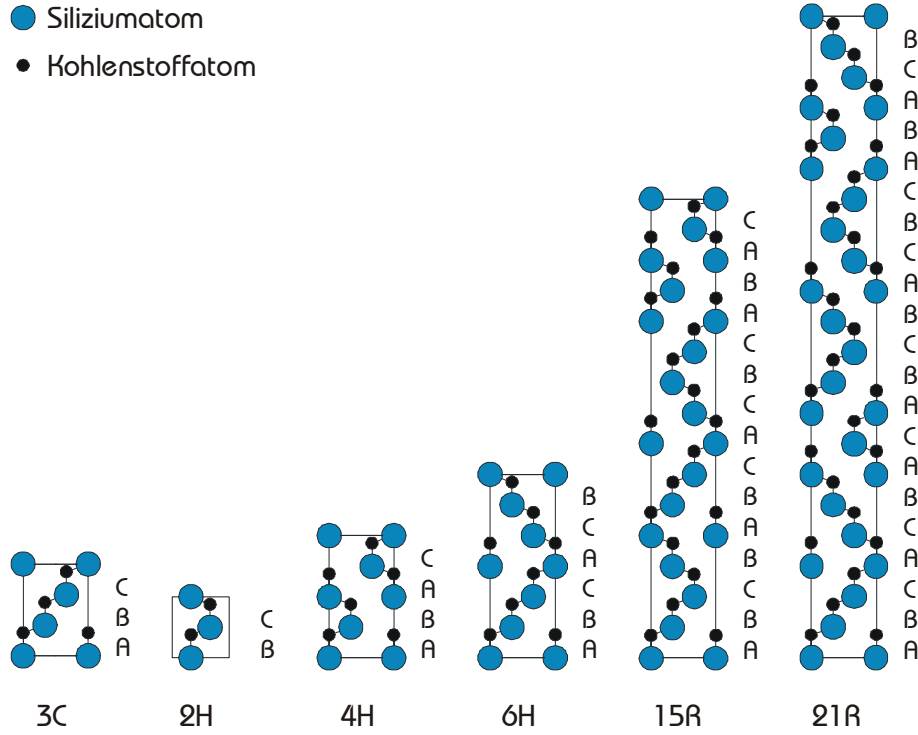


Abb. 2.2: Elementarzellen der Siliziumkarbid-Polytypen 3C, 2H, 4H, 6H, 15R und 21R. Dargestellt ist ein Schnitt durch die $(11\bar{2}0)$ -Ebene. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde die Struktur des Polytyps 3C ebenfalls in einer hexagonalen Zelle dargestellt. Rechts neben der Elementarzelle ist die Stapelfolge der einzelnen Polytypen angegeben.

Da es sich bei Siliziumkarbid um eine polare Struktur handelt, kann entweder die $[0001]$ - oder die $[000\bar{1}]$ -Richtung die positive Richtung der c -Achse vorgeben. In dieser Arbeit wurde die $[0001]$ -Richtung als positive Richtung gewählt. In der Nullposition der c -Achse befindet sich ein Siliziumatom und die Kohlenstoffzelle ist gegenüber der Siliziumzelle um $+\frac{3}{4n}c_{nH}$ verschoben (c_{nH} – c -Gitterkonstante des hexagonalen Polytyps nH , n – Anzahl der Si-C-Doppellagen pro Elementarzelle). Im weiteren soll nur die untere Hälfte der Elementarzelle betrachtet werden, die Atompositionen der oberen Hälfte können mit (2.2) berechnet werden. Für 2H-SiC gilt, da in der unteren Hälfte nur die Lage B besetzt ist:

$$\xi_2(\text{Si}) = 0, \quad \xi_2(\text{C}) = \frac{3}{8} + \varepsilon'_{2H}, \quad (2.3)$$

wobei ε'_{2H} die relative Abweichung in Einheiten der c -Gitterkonstante des Kohlenstoffatoms von der unrelaxierten Struktur darstellt. Für die 4H-Struktur, welche die Doppellagen A und B enthält, erhält man:

$$\begin{aligned} \xi_1(\text{Si}) &= 0, & \xi_1(\text{C}) &= \frac{3}{16} + \varepsilon'_{4H}(1), \\ \xi_2(\text{Si}) &= \frac{1}{4} + \delta'_{4H}(2), & \xi_2(\text{C}) &= \frac{7}{16} + \varepsilon'_{4H}(2), \end{aligned} \quad (2.4)$$

wobei o.B.d.A. $\delta'_{4H}(1) \equiv 0$ gesetzt wurde. Die drei zusätzlichen Freiheitsgrade werden mit $\delta'_{4H}(2)$, $\varepsilon'_{4H}(1)$ und $\varepsilon'_{4H}(2)$ berücksichtigt. Schließlich gilt für $6H$ -SiC:

$$\begin{aligned}\xi_1(\text{Si}) &= 0, & \xi_1(\text{C}) &= \frac{3}{24} + \varepsilon'_{6H}(1), \\ \xi_2(\text{Si}) &= \frac{1}{6} + \delta'_{6H}(2), & \xi_2(\text{C}) &= \frac{7}{24} + \varepsilon'_{6H}(2), \\ \xi_3(\text{Si}) &= \frac{2}{6} + \delta'_{6H}(3), & \xi_3(\text{C}) &= \frac{11}{24} + \varepsilon'_{6H}(3),\end{aligned}\quad (2.5)$$

mit den Abweichungen von der unrelaxierten Struktur $\delta'_{4H}(j)$ und $\varepsilon'_{4H}(j)$ ($j = 1, 2, 3$).

Bei den rhomboedrischen Polytypen $15R$ und $21R$ gibt es gemäß ihrer Raumgruppe $R3m$ (C_{3v}^5 , Internationale Tabellen № 160) eine Äquivalenz der einzelnen Drittel in der Elementarzelle. Beschreibt man die Elementarzellen in hexagonaler Basis, ergeben sich für die Atomkoordinaten des unteren Drittels des Polytyps $15R$ -SiC:

$$\begin{aligned}(0, 0, \xi_1(X)), & \quad (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \xi_2(X)), & \quad (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \xi_3(X)), \\ (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \xi_4(X)), & \quad (0, 0, \xi_5(X)),\end{aligned}\quad (2.6)$$

mit:

$$\xi_j(\text{Si}) = \frac{j-1}{15} + \delta'_{15R}(j), \quad \xi_j(\text{C}) = \frac{4(j-1)+3}{60} + \varepsilon'_{15R}(j), \quad (2.7)$$

wobei $j = 1 \dots 5$ und vereinbarungsgemäß $\delta'_{15R}(1) \equiv 0$ gilt. Die Atompositionen des zweiten Drittels der Elementarzelle erhält man durch Addition des Vektors $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3})$ mit den Atompositionen in (2.7), durch nochmaliges Addieren dieses Vektors die im oberen Drittel. $15R$ -SiC besitzt demnach neun zellinterne Freiheitsgrade. Analog lassen sich auch die Atompositionen von $21R$ -SiC beschreiben. Man erhält bei diesem Polytyp dreizehn zellinterne Freiheitsgrade. In Tab. 2.3 sind nochmals die Stapelfolge, die Hexagonalität^a sowie die Raumgruppe der hier vorgestellten Polytypen zusammengefasst.

Tab. 2.3: RAMSDELL-Notation, Stapelfolge, Hexagonalität sowie Raumgruppe einiger Siliziumkarbid-Polytypen.

RAMSDELL Notation	Stapelfolge	Hexagonalität	Raumgruppe
3C	ABC	0	$F\bar{4}3m$
2H	BC	1	$P6_3mc$
4H	ABAC	$\frac{1}{2}$	
6H	ABCACB	$\frac{1}{3}$	
15R	ABCBABCACBCABAC	$\frac{2}{5}$	$R3m$
21R	ABCACBACBCBACB-CABACB	$\frac{2}{7}$	

^a Die Hexagonalität ist das Verhältnis von Si-C-Doppellagen in hexagonaler Umgebung zur Gesamtzahl der Doppellagen.

3 Strukturverfeinerung von 4H- und 6H-SiC:

In diesem Kapitel wird zunächst die Problematik der atomaren Relaxationen an den zwei Polytypen 4H- und 6H-SiC erläutert, anschließend die aus der Literatur bekannten theoretischen und experimentellen Verfeinerungsmodelle vorgestellt. Den größten Anteil dieses Kapitels nimmt die Beschreibung der Methode der „fastverbotenen“ Reflexe zur Gewinnung der Verfeinerungsparameter ein. Am Ende des Kapitels wird der Einfluss der DEBYE-WALLER-Faktoren diskutiert.

3.1 Atomare Relaxationen

Außer bei der kubischen Struktur (3C-SiC) können die Positionen der Silizium- oder Kohlenstoffatome bei allen anderen Polytypen von den idealen Tetraederpositionen abweichen, es können sogenannte atomare Relaxationen auftreten (siehe Abschnitt 2.3.2.3), d.h. der Aufbau der Elementarzellen der einzelnen Polytypen kann sich in folgenden Punkten unterscheiden:

- Die Gitterkonstante a_{nY} , sowie die mittlere Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage $\frac{c_{nY}}{n}$ (n Anzahl der Si-C Doppellagen in der Elementarzelle, $Y = H, R$) können von Polytyp zu Polytyp unterschiedlich sein. Dies entspräche einem deformierten Tetraeder.
- Es können zellinterne Abweichungen der einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome in Richtung der c -Achse von der $\frac{c_{nY}j}{n}$ -Position (Silizium) bzw. $\frac{c_{nY}(4j+3)}{4n}$ -Position^a (Kohlenstoff) auftreten. Diese werden für das j -te Siliziumatom mit $\delta_{nY}(j)$ und für das j -te Kohlenstoffatom mit $\varepsilon_{nY}(j)$ bezeichnet.

Die Gitterkonstanten können durch hochpräzise Röntgendiffraktometrie (z. B. BOND-Methode), die atomaren Relaxationen durch die in dieser Arbeit vorgeschlagene Methode der „fastverbotenen“ Reflexe aus Integralintensitäten von *Rocking*-Kurven bestimmt werden.

^a Im Folgenden werden diese Lagen als Ideallagen bezeichnet.

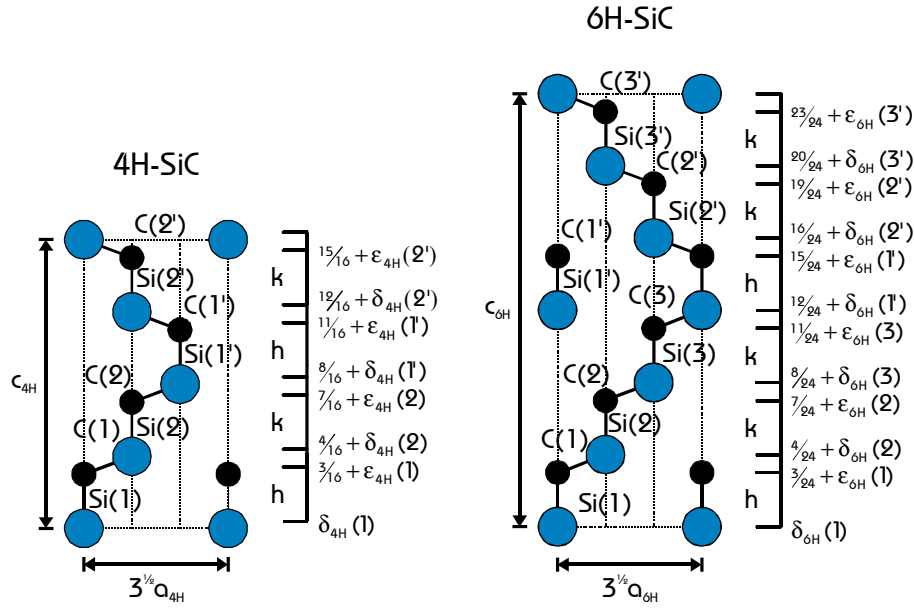


Abb. 3.1.: Elementarzellen von 4H- und 6H-SiC. Schnitt durch die $(11\bar{2}0)$ -Ebene. k bzw. h kennzeichnen die kubische bzw. hexagonale Umgebung einer Si-C-Doppellage in $[0001]$ -Richtung, c_{nH} bzw. a_{nH} die Gitterkonstanten. Die Atomkoordinaten sind in Einheiten der c -Gitterkonstanten dargestellt. $\delta_{nH}(j)$ bzw. $\varepsilon_{nH}(j)$ sind die relativen Abweichungen der Si- bzw. C-Atome in c -Richtung von der $\frac{c_{nH}j}{n}$ -Position (Si) bzw. $\frac{c_{nH}(4j+3)}{4n}$ -Position (C) ($n = 4$ (4H-SiC), 6 (6H-SiC); $j = 1 \dots n/2$) in der unteren Hälfte der Elementarzelle. Für die obere Hälfte (j') gilt Äquivalentes.

Die vorliegende Arbeit beschränkt sich bei der Bestimmung der zellinternen Parameter auf die Polytypen 4H- und 6H-SiC. Dies hat folgende Gründe: Die Polytypen 4H- und 6H-SiC sind in der Halbleiterforschung von großem Interesse und daher sind Kristalle von ausreichend guter kristalliner Qualität zu bekommen. Ein weiterer Grund ist, dass diese zwei Polytypen, abgesehen von der rein kubischen Modifikation 3C und der rein hexagonalen 2H, die beide als Einkristalle nicht zur Verfügung stehen, die Polytypen mit der niedrigsten Stapelperiode und damit auch mit den wenigsten Verfeinerungsparametern sind.

Abb. 3.1 zeigt die Elementarzellen der Polytypen 4H- und 6H-SiC. Die charakteristische Zickzack-Kettenstruktur ist in der $(11\bar{2}0)$ -Ebene dargestellt. Die Hälfte der Atome wird mit $X(1) \dots X(\frac{n}{2})$ ($X = \text{Si, C}$), die andere Hälfte mit $X(1') \dots X(\frac{n'}{2})$ bezeichnet. Die Positionen der Atome $X(j)$ und $X(j')$ sind auf Grund der Raumgruppensymmetrie äquivalent, deshalb gilt für die atomaren Verschiebungen aus der Ideallage:

$$\delta_{nH}(j) = \delta_{nH}(j'), \quad \varepsilon_{nH}(j) = \varepsilon_{nH}(j') \quad (3.1)$$

Im Gegensatz zu der Darstellung in Kapitel 2 (Abb. 2.2) wurde der Ursprung der 4H-SiC Zelle um den Vektor $(-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, -\frac{1}{4})$ verschoben, damit die Nummerierungen der Silizium- bzw. der Kohlenstoffatome und der Relaxationsparameter $\delta_{4H}(j)$ und $\varepsilon_{4H}(j)$ mit denen in den publi-

zierten Arbeiten von P. KÄCKELL (KÄCKELL *et al.* (1994, 1994a), KÄCKELL (1996)) übereinstimmen. Es gilt daher für 4H-SiC folgender Zusammenhang für die Relaxationsparameter $\delta_{4H}(j)$, $\varepsilon_{4H}(j)$ und $\delta'_{4H}(j)$, $\varepsilon'_{4H}(j)$ aus Kapitel 2:

$$\delta_{4H}(j) = \delta'_{4H}(j+1) \quad \varepsilon_{4H}(j) = \varepsilon'_{4H}(j+1) \quad (3.2)$$

Bei 6H-SiC soll weiterhin $\delta_{nY}(j) = \delta'_{nY}(j)$ bzw. $\varepsilon_{nY}(j) = \varepsilon'_{nY}(j)$ gelten.

Da $\delta_{nH}(1) \equiv 0$ (vgl. Kap. 2.3.2.3) gilt, gibt es für den Polytypen 4H-SiC drei, für 6H-SiC fünf zellinterne Verfeinerungsparameter.

3.2 Bekannte Relaxationsmodelle

In den folgenden Abschnitten werden die aus der Literatur bekannten Strukturverfeinerungsmodelle vorgestellt: zwei theoretische, basierend auf *ab-initio* Rechnungen, sowie zwei experimentelle, bei denen die Verfeinerungsparameter aus röntgendiffraktometrischen Messungen gewonnen wurden.

3.2.1 Theoretische Relaxationsmodelle aus *ab-initio* Rechnungen

3.2.1.1 Relaxationsmodell nach CHENG

Ein theoretisches Relaxationsmodell wurde von CHENG *et al.* (1990) entwickelt. Dabei wurde vom idealen Tetraeder (3C-SiC) ausgegangen und die Gesamtenergie der Elektronendichteverteilung, die durch normerhaltende Pseudopotentiale beschrieben wurde, für einzelne Polytypen (2H, 4H, 6H und 15R) minimiert. Dabei wurde angenommen, das Atom bestehe aus einem durch symmetrische Edelgaskonfiguration abgeschirmten Kern und den Valenzelektronen. Die Gesamtenergie wurde unter Verwendung der Lokale-Dichte-Näherung für die Austauschkorrelationsenergie minimiert. Aus den dadurch erhaltenen selbstkonsistenten Wellenfunktionen ließen sich Spannungen berechnen, die durch Variation der Atompositionen und der Gestalt und Größe der Elementarzelle an die des kubischen Falles (3C-SiC) angeglichen wurden. Durch Einführung eines einfachen Federmodells für die zwischenatomaren Kräfte, d.h. ohne Änderung des Bindungswinkels, konnten die Differenz der Energie, der spannungsfreien relaxierten Elementarzelle und der Energie im Falle idealer Tetraederbindung abgeschätzt werden. Der Vorteil dieses Modells ist im linearen Zusammenhang zwischen den Atomrelaxationen und Spannungen, sowie den Gitterkonstanten und atomaren Kräften zu sehen. Die Unterschiede der Relaxationsenergien zwischen einzelnen Polytypen liegen bei diesem Modell im μeV -Bereich. Das relaxierte Gitter ist in Bezug auf die zwischenatomaren Kräfte und Bindungen gegenüber dem unrelaxierten Gitter stabilisiert. In Tab. 3.1 sind die aus diesem Modell gewonnenen Atomverrückungen, sowie das auf eine Doppellage normierte Verhältnis der *c*- zur *a*-Gitterkonstanten aufgelistet.

3.2.1.2 Relaxationsmodell nach KÄCKELL

Ebenfalls aus *ab-initio* Rechnungen wurde ein Relaxationsmodell von P. KÄCKELL (KÄCKELL *et al.* (1994), KÄCKELL (1996)) für die Polytypen 3C-, 2H-, 4H- und 6H-SiC im Rahmen seiner Promotion am Institut für Festkörpertheorie und Theoretische Optik der Universität Jena entwickelt. Dieses Modell beschreibt mittels gut konvergierter Dichte-Funktional-Rechnungen die Grundzustandseigenschaften der SiC-Polytypen 3C-, 2H-, 4H- und 6H-SiC. Das Austausch-Korrelations-Funktional des Elektron-Elektron-Vielkörperproblems wurde durch seine lokale Version angenähert, die Elektron-Ion-Wechselwirkung durch normerhaltende, vollseparable *ab-initio* Pseudopotentiale behandelt. Die Wellenfunktionen der Elektronen wurden durch die Überlagerung ebener Wellen beschrieben, deren Maximalzahl durch eine Grenzenergie abbrechen. Die Einbeziehung der Raumgruppe und der damit verbundenen Symmetrie in der Elementarzelle führte zur Vermeidung von Mehrdeutigkeiten beim Auffinden des Energieminimums. Die so erhaltenen Atomverrückungen sowie das $\frac{c}{na}$ -Verhältnis sind für 2H-, 4H- und 6H-SiC in Tab. 3.1 aufgeführt.

Tab. 3.1: Strukturgrößen aus *ab-initio* Rechnungen nach CHENG und KÄCKELL. Die CHENGschen Strukturgrößen wurden aus den in CHENG *et al.* (1990) in Tab. 5 bzw. Abb. 1–3^a gegebenen Daten berechnet. Fehlergrenzen geben CHENG *et al.* keine an. Bei KÄCKELL wird ein Fehler der Atomkoordinaten von 0.0002 nm genannt, d.h. die Fehler für $\delta_{nH}(j) \cdot 10^4$ bzw. $\varepsilon_{nH}(j) \cdot 10^4$ sind für 2H-SiC etwa ± 4.0 , für 4H-SiC ± 2.0 und für 6H-SiC ± 1.3 . $\delta_{nH}(1)$ ist per Definition fehlerfrei.

Polytyp	$\frac{c}{na}$		j	$\delta_{nV}(j) \cdot 10^4$ (Si)		$\varepsilon_{nV}(j) \cdot 10^4$ (C)	
	CHENG	KÄCKELL		CHENG	KÄCKELL	CHEN	KÄCKELL
2H	0.8202	0.8185	1	0	0	10.4	8.0
4H	0.8182	0.8185	1	0	0	6.1	4.8
			2	-1.0	-2.1	-0.9	-2.3
6H	0.8176	0.8177	1	0	0	3.9	3.7
			2	0.4	0.3	0.6	0.6
			3	-1.4	-1.2	-1.2	-0.9
15R ^b	0.8179	—	1	0	—	1.8	—
			2	0.3	—	0.3	—
			3	-0.5	—	-0.6	—
			4	-0.1	—	1.4	—
			5	-0.4	—	-0.3	—

^a Da in CHENG *et al.* (1990) die Strukturparameter für den Polytyp 15R (<23>) in Abb. 4 und Tab. 5 nicht übereinstimmen, wurden für die Berechnung die Strukturparameter aus Tab. 5 verwendet, da diese plausibler erscheinen.

^b Bei 15R-SiC wurde der Ursprung der Elementarzelle so gewählt, dass der dem fünften Siliziumatom von unten in Abb. 2.2 entspricht. Dies entspricht folgender Abfolge der Bindungen in Abb. 4 in CHENG *et al.* (1990): $l_1, l_{10}, l_9, l_8, l_7, l_6, l_5, l_4, l_3$ und l_2 .

Die beiden aus *ab-initio* Rechnungen gewonnenen Relaxationsmodelle stimmen sowohl qualitativ als auch quantitativ sehr gut überein. Die Vorzeichen stimmen für alle vergleichbaren Parameter bei beiden Modellen überein. Auch die auf eine Doppellage normierten Verhältnisse der Gitterkonstanten $\frac{c}{na}$ zeigen, abgesehen von dem Polytyp 2H, eine Übereinstimmung bis auf wenige Prozent. Nimmt man an, dass die Rechnungen von CHENG *et al.* in etwa die Genauigkeit der Rechnungen von KÄCKELL *et al.* besitzen, liegen alle Werte eines Modells in den Fehlergrenzen des anderen. Trotz verschiedener Berechnungsgrundlage sind die beiden Modelle innerhalb ihrer Genauigkeit nicht zu unterscheiden.

3.2.2 Relaxationsmodelle auf der Basis von Röntgenbeugungsexperimenten

3.2.2.1 Strukturverfeinerungsmodell nach GOMES DE MESQUITA

Ein erstes experimentelles Relaxationsmodell wurde 1967 von A. H. GOMES DE MESQUITA (GOMES DE MESQUITA (1967)) für 6H-SiC ermittelt. Motiviert wurden diese Untersuchungen durch die Tatsache, dass das $\frac{c}{a}$ -Verhältnis von 6H-SiC nicht mit dem der idealen Tetraederstruktur übereinstimmt. Die Strukturverfeinerung wurde auf zwei Arten durchgeführt, zum einem durch die Methode der kleinsten Fehlerquadrate (*least-squares*), zum anderen durch FOURIER-Differenzsynthese (z.B. WOOLFSON (1997)). Bei der *least-squares*-Methode wurden 19 Parameter verfeinert (fünf *z*-Koordinaten, zwölf Temperaturfaktoren, ein Skalenfaktor und ein Parameter der sekundären Extinktion). Die Konvergenz dieser Methode war schlecht, der *R*-Wert^a betrug 2.1 %. Die Verfeinerung mit FOURIER-Differenzsynthese konvergierte besser, es wurden allerdings folgende Vereinfachungen vorgenommen: Die Anzahl der Temperaturfaktoren wurde auf zwei für jede Atomsorte reduziert ($\parallel c$ und $\perp c$). Außerdem konnte keine Aussage zur Position der Si-C-Doppellagen mit hexagonaler Umgebung gemacht werden, daher wurde angenommen, dass der Abstand der hexagonalen Doppellage zu den beiden benachbarten kubischen Doppellagen gleich ist. In Tab. 3.2 sind die aus den beiden Methoden ermittelten Strukturgrößen, sowie das normierte $\frac{c}{a}$ -Verhältnis aufgeführt.

Tab. 3.2: Strukturgrößen von 6H-SiC nach GOMES DE MESQUITA.

Polytyp	$\frac{c}{na}$	Methode	<i>j</i>	$\delta_{6H}(j) \cdot 10^4$ (Si)	$\epsilon_{6H}(j) \cdot 10^4$ (C)
6H	0.8180 ±0.0003	<i>least squares</i>	1	0.0	3.9
			2	0.6	1.9
			3	-1.6	0.4
		FOURIER	1	0.0	2.7
			2	1.1	2.1
			3	-1.0	1.7

^a Der *R*-Wert ist ein Maß für die Übereinstimmung der gemessenen Strukturgrößen mit denen des Modells.

3.2.2.2 Strukturverfeinerungsmodell nach KUSCHNERUS

Im Rahmen einer Diplomarbeit am Institut für Optik und Quantenelektronik der Universität Jena wurde von P. KUSCHNERUS (KUSCHNERUS (1996)) erstmalig eine Strukturverfeinerung an 6H-SiC durchgeführt, die auf der Verwendung von „fastverbotenen“ Reflexen basiert (vgl. Kap. 3.3). Bei diesem Verfahren können nur Linearkombinationen der Relaxationsparameter $\delta_{6H}(j)$ und $\varepsilon_{6H}(j)$ bestimmt werden, wodurch sich die Anzahl der Verfeinerungsparameter von fünf auf vier reduziert. Diese vier Parameter sind nur bis auf das Vorzeichen bestimmbar, d.h. die Strukturverfeinerung ergab kein eindeutiges Ergebnis. Bedingt durch das von KUSCHNERUS verwendete Auswerteverfahren, konnten nur drei der Parameter unabhängig voneinander bestimmt werden. Um diese Mehrdeutigkeiten zu beseitigen, wurden folgende Annahmen gemacht: Um die Uneindeutigkeit im Vorzeichen zu beseitigen, wurden die experimentell ermittelten Verfeinerungsparameter mit denen mittels *ab-initio* Rechnungen bestimmten Parametern verglichen (vgl. Kap. 3.2.1.1 u. 3.2.1.2). Da alle Relaxationsparameter von CHENG *et al.* und KÄCKELL *et al.* für 6H-SiC (Tab. 3.1) im Vorzeichen übereinstimmen, wurde als Lösung diejenige ausgewählt, die im Vorzeichen mit diesen beiden theoretischen Modellen im Einklang steht. Die Reduzierung der Verfeinerungsparameter von vier auf drei erfolgte durch gleichsetzen von $\delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3)$ mit $\varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3)$. Dies bedeutet, dass die Silizium-Kohlenstoff-Bindungen parallel zur *c*-Achse der beiden Doppellagen mit kubischer Umgebung gleich lang sind und damit also auch die Bindungen zwischen den Atomen Si(2) und C(2) und den Atomen Si(3) und C(3) (Abb. 3.1). Diese Annahme steht ebenfalls in Einklang mit den Ergebnissen von KÄCKELL *et al.* und CHENG *et al.*

In Tab. 3.3 sind die mit diesen Annahmen ermittelten Strukturdaten aufgeführt, sowie ein Vergleich mit den zwei *ab-initio* Modellen und den Verfeinerungsparametern nach GOMES DE MESQUITA für den Polytyp 6H-SiC. Der Vergleich aller vier Modelle von 6H-SiC ergibt zumindest eine qualitative Übereinstimmung der Verfeinerungsparameter nach KUSCHNERUS mit den zwei theoretischen Modellen. Das *least squares* Modell nach GOMES DE MESQUITA stimmt gut mit den *ab-initio* Modellen überein, dagegen zeigt das FOURIER-Modell, obwohl es besser konvergiert, deutliche Abweichungen von den drei anderen Strukturvorschlägen.

Tab. 3.3: Strukturgrößen des Polytypen 6H-SiC nach KUSCHNERUS, GOMES DE MESQUITA, CHENG und KÄCKELL. (*l.s.*) steht für *least squares*, (F.) für FOURIER. Es gilt: $\eta_{6H}(1) = \delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3)$, $\eta_{6H}(2) = \delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1)$, $\zeta_{6H}(1) = \varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3)$, $\zeta_{6H}(2) = \varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1)$.

Modell	$\eta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\eta_{6H}(2) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(2) \cdot 10^4$
KUSCHNERUS	2.0	-0.5	2.0	-7.1
GOMES (<i>l.s.</i>)	2.2	-1.0	1.5	-5.5
GOMES (F.)	2.1	0.1	0.4	-1.6
CHENG	1.8	-1.0	1.8	-8.4
KÄCKELL	1.5	-0.9	1.5	-7.7

3.2.3 Folgerungen aus den vorhandenen Strukturmodellen

Die bisherigen experimentellen Strukturvorschläge beziehen sich nur auf den Polytyp 6H-SiC, kommen nicht ohne zusätzliche Annahmen aus (KUSCHNERUS, GOMES DE MESQUITA (FOURIER)) oder konvertieren schlecht (GOMES DE MESQUITA (*least squares*)). In Erweiterung zu diesen experimentellen Strukturverfeinerungen von Siliziumkarbid soll im Rahmen dieser Arbeit Folgendes erreicht werden:

- Ein eindeutiges Strukturmodell auf der Basis von „fastverbotenen“ Reflexen zu entwickeln.
- Ein unabhängiges Strukturmodell aus experimentellen Werten zu erhalten, das keine zusätzlichen Annahmen benötigt.
- Eine Erweiterung auf andere Polytypen, insbesondere auf 4H-SiC vorzunehmen.
- Die Genauigkeit im Vergleich zu den vorhandenen experimentellen Verfeinerungsmodellen zu erhöhen.

3.3 Strukturverfeinerung mit „fastverbotenen“ Reflexen

Die Strukturverfeinerung der Siliziumkarbid-Polytypen 4H und 6H mit „fastverbotenen“ Reflexen basiert auf der Lösung eines Gleichungssystems, bei dem aus den Absolutbeträgen der Strukturfaktoren dieser Reflexe Linearkombinationen der Relaxationsparameter $\delta_{nH}(j)$ für die Siliziumatome und $\varepsilon_{nH}(j)$ für die Kohlenstoffatome in der Elementarzelle ermittelt werden. In den folgenden Abschnitten wird diese Methode genauer erläutert.

3.3.1 „Fastverbotene“ Reflexe

Als „fastverbotene“ Reflexe werden solche Reflexe bezeichnet, deren Strukturfaktor verschwinden würde, wenn sich die Silizium- und Kohlenstoffatome auf den idealen Plätzen befänden, wenn also gelten würde: $\delta_{nH}(j) = 0$ und $\varepsilon_{nH}(j) = 0$. Reflexe, die bezüglich der Symmetrie der Raumgruppe ausgelöscht sind, sollen im folgenden als strukturverbotenen bezeichnet werden. Als dritte Gruppe treten noch die starken Reflexe auf, deren Strukturfaktoren stets von Null verschieden sind. In Tab. 3.4 ist dargestellt, für welche MILLER-Indizes starke, „fastverbotene“ bzw. strukturverbotene Reflexe bei 4H- und 6H-SiC auftreten. Bei dem Polytyp 6H gibt es zwei verschiedene Auswahlregeln für „fastverbotene“ Reflexe, die als Typ I- und Typ II-Reflexe bezeichnet werden sollen. Die Verwendung von „fastverbotenen“ Reflexen zur Strukturverfeinerung hat folgende Vorteile:

- i. Die „fastverbotenen“ Reflexe reagieren sehr stark auf eine extrem kleine Änderung der atomaren Struktur in der Elementarzelle, da ihr Strukturfaktor im unrelaxierten Gitter verschwindet. Jede kleine Änderung der Struktur führt zu einer deutlichen Än-

derung des Strukturfaktors und damit der eigentlichen Messgröße, der Integralintensität der entsprechenden Beugungsordnung. Im Gegensatz dazu ist die relative Änderung der Strukturfaktoren der starken Reflexe durch den Einfluss der Relaxationen sehr gering. In Tab. 3.5 ist für die beiden starken 6H-SiC Reflexe 00.6^a und 00.12 jeweils der Absolutbetrag des Strukturfaktors $|F(hk.l)|$ für das nach dem KÄCKELLSchen Modell berechnete relaxierte, sowie $|F_0(hk.l)|$ für das unrelaxierte Gitter dargestellt. Die relativen Änderungen liegen weit unter einem Prozent.

- ii. Bei den „fastverbotenen“ Reflexen ist keine Extinktionskorrektur notwendig, da die Extinktionstiefe^b t_{ext} viel größer als die Absorptionstiefe t_{abs} ist (z.B.: 6H-SiC 00.10, $t_{\text{ext}} \approx 900 \mu\text{m}$, $t_{\text{abs}} \approx 17 \mu\text{m}$, $\text{CuK}\alpha_1$, Modell KÄCKELL, symmetrischer BRAGG-Fall, σ -Polarisation), d.h. kinematische Näherung und streng dynamische Rechnung ergeben die gleichen Integralintensitäten (Tab. 3.5). Dies bedeutet ebenfalls, dass die Perfektion des Kristalls eine untergeordnete Rolle spielt. In Tab. 3.5 sind die Integralintensitäten für die Grenzfälle idealer Einkristall (dynamische Theorie), d.h. $\rho_{\text{dyn}} \sim |F(hk.l)|$ und Mosaikkristall d.h. $\rho_{\text{kin}} \sim |F(hk.l)|^2$ für „fastverbotene“ und starke Reflexe gezeigt. Bei den starken Reflexen 00.6 und 00.12 unterscheiden sich die Integralintensitäten für diese zwei Fälle erheblich, während sie für die „fastverbotenen“ Reflexe praktisch identisch sind. Aufgrund der Tatsache, dass SiC-Einkristalle momentan nicht in ausreichender Perfektion zur Verfügung stehen, bietet die Anwendung von „fastverbotenen“ Reflexen praktisch die einzige Möglichkeit, eine Strukturverfeinerung durchzuführen.
- iii. Die Strukturverfeinerung mit „fastverbotenen“ Reflexen liefert ein analytisches Ergebnis. Im Gegensatz zu anderen Strukturverfeinerungsverfahren (z.B.: *least squares*) sind keine iterativen Näherungsverfahren notwendig.

Tab. 3.4: Regeln für das Auftreten von starken Reflexen, „fastverbotenen“ und strukturverbotenen Reflexen von 4H- und 6H-SiC. h, k, l sind die MILLERSchen Indizes, r und s ganze Zahlen; \wedge bedeutet ein logisches „und“.

Polytyp	starke Reflexe	„fastverbotene“ Reflexe	strukturverbotene Reflexe
4H	$h - k = 3r \wedge l = 4s$ oder $h - k \neq 3r$	$h - k = 3r \wedge l = 2s$ $\wedge l \neq 4s$	$h - k = 3r$ $\wedge l = 2s + 1$
6H	$h - k = 3r \wedge l = 6s$ oder $h - k \neq 3r \wedge l \neq 6s$	$h - k = 3r \wedge l = 2s$ $\wedge l \neq 6s$ (Typ I) oder $h - k \neq 3r \wedge l = 6s$ (Typ II)	$h - k = 3r$ $\wedge l = 2s + 1$

^a In dieser Arbeit wird der dritte MILLER-Index i durch einen Punkt (.) ersetzt.

^b Einige Grundbegriffe der Röntgenbeugung, u.a. die Extinktionstiefe, werden im Anhang A erklärt.

Tab. 3.5: Strukturfaktoren $|F(hk.l)|$ (relaxierte Struktur nach KÄCKELL) und $|F_0(hk.l)|$ (unrelaxierte Struktur), sowie die Integralintensitäten ρ_{dyn} und ρ_{kin} ($\lambda = 0.1540562$ nm, σ -Pol.). Die Rechnungen wurden mit dem Programm „DIXI“ (HÖLZER *et al.* (1998)) durchgeführt. Starke Reflexe sind hervorgehoben.

Reflex	$ F(hk.l) $	$ F_0(hk.l) $	ρ_{dyn} [μrad]	ρ_{kin} [μrad]
00.2	0.0962	0	0.0030	0.0031
00.4	0.0768	0	0.0009	0.0010
00.6	61.408	61.301	44.5	863
00.8	0.2099	0	0.0040	0.0041
00.10	0.0826	0	0.0006	0.0005
00.12	32.577	31.575	5.13	106

Neben den unbestrittenen Vorteilen bringt eine Strukturverfeinerung auf Basis der „fastverbotenen“ Reflexe auch einige Probleme mit sich:

- i. Praktisch können nur Linearkombinationen der einzelnen Silizium-, bzw. der einzelnen Kohlenstoff-Relaxationsparameter ($\delta_{nH}(j)$ bzw. $\varepsilon_{nH}(j)$) untereinander bestimmt werden (s. Kap. 3.3.2).
- ii. Die Bestimmung der Relaxationsparameter ist nicht eindeutig. Um diese Mehrdeutigkeiten zu beseitigen, sind Phaseninformationen notwendig. Diese wurden durch Messung von Mehrstrahlfällen erhalten (s. Kap. 4).
- iii. Die „fastverbotenen“ Reflexe haben sehr kleine Strukturfaktoren und damit auch sehr kleine Integralintensitäten. Im Vergleich zu starken Reflexen sind diese bis zu einem Faktor von 10^5 vermindert (Tab. 3.5). Dies hat sehr lange Messzeiten zur Folge, daher wurden Messungen am Synchrotron durchgeführt.
- iv. Der Einfluss der Umweganregung (s. Kap. 4) wirkt sich bei „fastverbotenen“ Reflexen störend aus. Dieser Einfluss wurde durch Vergleich von simulierten mit gemessenen Umwegprofilen korrigiert.
- v. Die gängigen Strukturverfeinerungsverfahren (z.B.: STOUT & JENSEN (1989), WOOLFSON (1997)) sind nicht oder nur bedingt auf „fastverbotene“ Reflexe anwendbar. Die Differenz-FOURIER-Synthese benötigt starke Reflexe, da die Phase des Strukturfaktors der Ausgangsstruktur ähnlich der Phase der verfeinerten Struktur sein muss. Die Phase des Strukturfaktors der „fastverbotenen“ Reflexe hängt jedoch sehr empfindlich vom Verfeinerungsmodell ab. Bei der *least-squares*-Methode können mit „fastverbotenen“ Reflexen ebenfalls nur die Linearkombinationen der Verfeinerungsparameter bestimmt werden, da der Strukturfaktor eines „fastverbotenen“ Reflexes für die Linearkombinationen von $\delta_{nH}(j)$ und $\varepsilon_{nH}(j)$ praktisch konstant bleibt.

3.3.2 Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe

Der Strukturfaktor eines „fastverbotenen“ Reflexes (Tab. 3.4) $F_{\text{qf}}(hk.l)$ ist gegeben durch^a:

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = f_T^{\text{Si}}(hk.l) \sum_{j=1}^n e^{2\pi i(x_j^{\text{hex}}h + y_j^{\text{hex}}k + (z_j^{\text{hex}} + \delta_{nH}(j))l)} + f_T^{\text{C}}(hk.l) \sum_{j=1}^n e^{2\pi i(x_j^{\text{hex}}h + y_j^{\text{hex}}k + (z_j^{\text{hex}} + \varepsilon_{nH}(j))l)}, \quad (3.3)$$

wobei $x_j^{\text{hex}}, y_j^{\text{hex}}, z_j^{\text{hex}}$ die Koordinaten des j -ten Silizium- bzw. Kohlenstoffatoms in Ideallage in der Elementarzelle im hexagonalen System sind und $f_T^X(hk.l)$ die mit den Temperaturfaktoren multiplizierten Atomformfaktoren^b. Zur z -Komponente werden die Abweichungen $\delta_{nH}(j)$ und $\varepsilon_{nH}(j)$ aus den idealen Atomlagen hinzuaddiert.

3.3.2.1 4H-SiC

Für den Siliziumkarbid Polytypen 4H ergibt sich für den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe (Tab. 3.4) nach Einsetzen der Atomkoordinaten in (3.3):

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = f_T^{\text{Si}}(hk.l) \left[e^{2\pi i \delta_{4H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{4} + \delta_{4H}(2) \right)l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{2}{4} + \delta_{4H}(1) \right)l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \delta_{4H}(2) \right)l \right)} \right] + f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[e^{2\pi i \varepsilon_{4H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{4} + \varepsilon_{4H}(2) \right)l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{2}{4} + \varepsilon_{4H}(1) \right)l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \varepsilon_{4H}(2) \right)l \right)} \right] e^{2\pi i \frac{3}{16}l}, \quad (3.4)$$

wobei der Faktor $e^{2\pi i \frac{3}{16}l}$ die Verschiebung der idealen Kohlenstoffzelle gegenüber der idealen Siliziumzelle um $\frac{3}{16}$ in Einheiten der c -Gitterkonstante beschreibt.

Die zu erwarteten Atomverrückungen aus der Ideallage sind im Vergleich zur c -Gitterkonstanten sehr klein. Nach den oben vorgestellten Modellen liegen sie in der Größenordnung von 10^{-4} in Einheiten der c -Gitterkonstanten. Deshalb ist es zulässig den Strukturfaktor nach den Relaxationsparametern $\delta_{4H}(j)$ und $\varepsilon_{4H}(j)$ bis zur ersten Ordnung zu entwickeln und alle höheren Ordnungen zu vernachlässigen.

Mit $e^{2\pi i \delta_{4H}(j)l} \approx 1 + 2\pi i \delta_{4H}(j)l$ und $e^{2\pi i \varepsilon_{4H}(j)l} \approx 1 + 2\pi i \varepsilon_{4H}(j)l$ ergibt sich nach einigen Vereinfachungen^c:

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = 4\pi i l f_T^{\text{Si}}(hk.l) [\delta_{4H}(1) - \delta_{4H}(2)] + 4\pi i l f_T^{\text{C}}(hk.l) [\varepsilon_{4H}(1) - \varepsilon_{4H}(2)] e^{\frac{3}{8}\pi i l} \quad (3.5)$$

^a Der Index qf steht für englisch „*quasiforbidden*“.

^b Zur Bezeichnung der Strukturfaktoren siehe Anhang A.

^c Eine ausführliche Herleitung von (3.5) findet sich in Anhang D.

Der Strukturfaktor (3.5) enthält die Relaxationsparameter $\delta_{4H}(j)$ und $\varepsilon_{4H}(j)$ nur in Linearkombinationen. Aus (3.5) wird ersichtlich, dass eine vollständige Bestimmung der Atompositionen in den Silizium- bzw. Kohlenstoffteilzellen möglich ist, die absolute Verschiebung der beiden Teilzellen kann jedoch in der hier zulässigen linearen Näherung nicht ermittelt werden. Werden die Linearkombination der Atomverrückungen in (3.5) durch

$$\eta_{4H} := \delta_{4H}(1) - \delta_{4H}(2) \quad \zeta_{4H} := \varepsilon_{4H}(1) - \varepsilon_{4H}(2) \quad (3.6)$$

substituiert, folgt für den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe von 4H-SiC:

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = 4\pi i l f_T^{\text{Si}}(hk.l) \eta_{4H} + 4\pi i l f_T^{\text{C}}(hk.l) \zeta_{4H} e^{\frac{2}{3}\pi i l} \quad (3.7)$$

Bei einer Analyse von *Rocking*-Kurven kann über die Integralintensität nur der Betrag des Strukturfaktors bestimmt werden. Bildet man von (3.7) das Quadrat des Absolutbetrags erhält man für $l = 2, 14, 18, 30 \dots$:

$$\begin{aligned} |F_{\text{qf}}(hk.l)|^2 = 16\pi^2 l^2 \big[& f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{4H}^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{4H}^2 \\ & - \sqrt{2} f_T^{\text{Si}}(hk.l) f_T^{\text{C}}(hk.l) \eta_{4H} \zeta_{4H} \big] \end{aligned} \quad (3.8)$$

und für $l = 6, 10, 22, 26 \dots$:

$$\begin{aligned} |F_{\text{qf}}(hk.l)|^2 = 16\pi^2 l^2 \big[& f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{4H}^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{4H}^2 \\ & + \sqrt{2} f_T^{\text{Si}}(hk.l) f_T^{\text{C}}(hk.l) \eta_{4H} \zeta_{4H} \big] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Um die Gleichungen übersichtlicher zu gestalten wurde in der obigen Darstellung der Imaginärteil des Atomformfaktors $f_T^X(hk.l)^a$ (Dispersionskorrektur $\Delta f''$) nicht berücksichtigt. Dies ist zulässig, da bei den in dieser Arbeit verwendeten Energien der Röntgenstrahlen immer gilt: $\text{Re}[f_T^X(hk.l)] \gg \text{Im}[f_T^X(hk.l)]$. Da die Atomformfaktoren $f_T^X(hk.l)$ reflexabhängig sind und Differenz zwischen $f_T^{\text{Si}}(hk.l)$ und $f_T^{\text{C}}(hk.l)$ über $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ nicht konstant ist^b, lässt sich für jeden „fastverbotenen“ Reflex eine unabhängige Gleichung nach (3.8) oder (3.9) aufstellen. Abb. 3.2 zeigt den Verlauf der Atomformfaktoren $f_0^{\text{Si}}(hk.l)$ und $f_0^{\text{C}}(hk.l)^c$ in Abhängigkeit von $\frac{\sin\theta}{\lambda}$. Über die BRAGG-Gleichung ergibt sich eine Abhängigkeit vom Netzebenenabstand und damit von den MILLER-Indizes. Die Lösungsmenge der Gleichungen (3.8) bzw. (3.9) für η_{4H} und ζ_{4H} liegt auf einer Ellipse^d, deren Halbachsen sich im Ursprung schneiden und um einen bestimmten Winkel gegenüber der η_{4H} -Achse bzw. der ζ_{4H} -Achse gedreht ist.

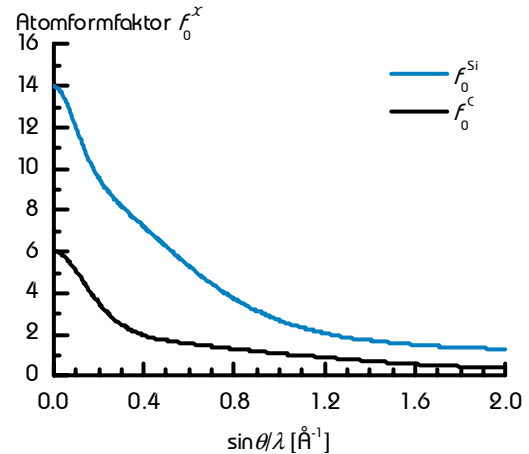
^a In Anhang D.3 findet sich der Absolutbetrag der Strukturfaktoren unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen.

^b Wäre $f_T^{\text{Si}}(hk.l) - f_T^{\text{C}}(hk.l) = \text{const}$ über den gesamten Verlauf von $\sin\theta/\lambda$, könnten nicht mehr als zwei unabhängige Gleichungen aus (3.8) und (3.9) aufgestellt werden.

^c $f_T^X(hk.l)$ und $f_0^X(hk.l)$ unterscheiden sich in ihrem Verlauf über $\sin(\theta/\lambda)$ qualitativ nur unwesentlich, da die anormalen Dispersionskorrekturen klein sind und der DEBYE-WALLER-Term nur langsam abnimmt.

^d Im Allgemeinen liegt die Lösungsmenge auf einem Kegelschnitt (Ellipse, Hyperbel, Parabel). Eine analytische Lösung des Gleichungssystems findet sich in Anhang E.

Abb. 3.2: Atomformfaktoren für Silizium f_0^{Si} (—) und Kohlenstoff f_0^{C} (—).



Zwei solche Ellipsen haben im Allgemeinen miteinander vier Schnittpunkte, wobei sich die Koordinaten von jeweils zwei Schnittpunkten nur im Vorzeichen unterscheiden. Dies bedeutet, dass sich jeweils aus zwei Gleichungen vier eindeutige Lösungen ergeben. Da aber im Idealfall (d.h. korrektes Relaxationsmodell, keine Messfehler *etc.*) die Ellipsen für alle „fastverbotenen“ Reflexe zwei gemeinsame Schnittpunkte haben müssen, die sich nur im Vorzeichen unterscheiden, benötigt man mindestens drei Reflexe, um diese Schnittpunkte zu erhalten. Abb. 3.3 zeigt für ein vorgegebenes Relaxationsmodell (Modell KÄCKELL) für vier Reflexe die Ellipsen der Lösungen der Gleichungen (3.8) und (3.9). Eine Unterscheidung der zwei verbleibenden Lösungen ist nur aus Informationen der Phase des Strukturfaktors möglich (siehe Kap. 4).

Aus experimenteller Sicht erweist es sich als günstig, jeweils solche zwei Reflexe zur Bestimmung von η_{4H} und ζ_{4H} zu verwenden, die sich in einem Winkel nahe 90° schneiden, also einen Reflex der (3.8) mit einem der (3.9) genügt zur Lösung des Gleichungssystems heranzuziehen. Würde man z.B. das Gleichungssystem für 00.6 und 00.10 lösen, würde ein kleiner Messfehler, der sich in der Länge der Halbachsen der Ellipsen auswirkt, aufgrund des sehr kleinen Schnittwinkels (Abb. 3.3) zu einem großen Fehler bei der Bestimmung der Relaxationsparameter führen.

Abb. 3.3: Lösungen der Gleichungen (3.8) und (3.9) für die „fastverbotenen“ 4H-SiC Reflexe 00.2, 00.6, 0010 und 00.14 für das vorgegebene Relaxationsmodell nach KÄCKELL ($\eta_{4H} = 0.00021$, $\zeta_{4H} = 0.00071$). $+1_{4H}$ bzw. -1_{4H} kennzeichnen die gemeinsamen Lösungen aller Gleichungen.

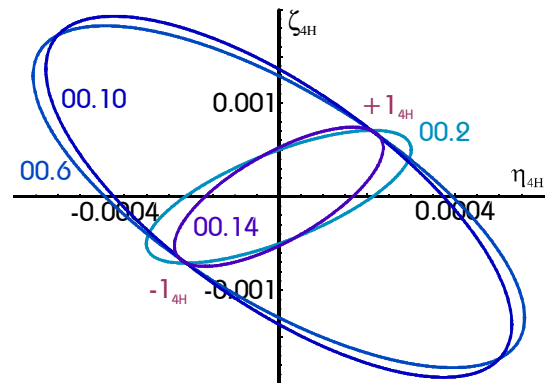
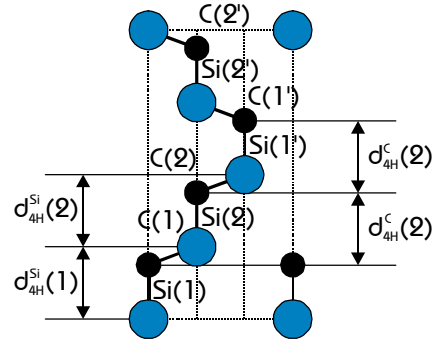


Abb. 3.4: Elementarzelle von 4H-SiC: $d_{4H}^{Si}(j)$ bezeichnet die Dicke einer Si-C-Doppellage vom j -ten bis zum $(j+1)$ -ten Si-Atom. $d_{4H}^C(j)$ vom j -ten bis zum $(j+1)$ -ten C-Atom..



Aus den Parametern η_{4H} und ζ_{4H} können wichtige Strukturgrößen, die auch etwas anschaulicher sind, abgeleitet werden, wie u.a. die relative Änderung der Dicke der Silizium-Kohlenstoff-Doppellage bezogen auf die Siliziumatome (Abb. 3.4)^a:

$$\frac{\Delta d_{4H}^{Si}(j)}{d_0^{4H}} = \frac{d_{4H}^{Si}(j) - \frac{1}{4}c_{4H}}{\frac{1}{4}c_{4H}} = 4[\delta(j+1) - \delta(j)] = \mp 4\eta_{4H}, \quad (3.10)$$

und bezogen auf die Kohlenstoffatome:

$$\frac{\Delta d_{4H}^C(j)}{d_0^{4H}} = \frac{d_{4H}^C(j) - \frac{1}{4}c_{4H}}{\frac{1}{4}c_{4H}} = 4[\varepsilon(j+1) - \varepsilon(j)] = \mp 4\zeta_{4H} \quad (3.11)$$

wobei $d_0^{4H} = \frac{1}{4}c_{4H}$ gilt. Für $j = 1$ gilt das Minuszeichen und für $j = 2$ das Pluszeichen. Aus diesen lassen sich noch weitere Strukturgrößen ableiten, wie z.B. die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge in c -Richtung vom j -ten Siliziumatom bis zum j -ten Kohlenstoffatom und die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge vom j -ten Kohlenstoffatom bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die $[0001]$ -Richtung. Mit den im Rahmen dieser Arbeit gemessenen absoluten Gitterparametern und den oben genannten Parametern lassen sich absolute Dicken der Doppellagen bestimmen. Eine ausführliche Diskussion dieser Parameter anhand der Messergebnisse findet in Kapitel 7 statt.

3.3.2.2 6H-SiC

Für 6H-SiC ergibt sich für den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe nach Einsetzen der Atomkoordinaten in (3.3):

^a Für alle Indizes in Klammer gilt, dass sie nicht größer als $n/2$ werden können. Ist z.B. $j = n/2$, so wird $j+1$ durch 1 ersetzt, $j+2$ durch 2 etc.

$$\begin{aligned}
F_{\text{qf}}(hk.l) = f_T^{\text{Si}}(hk.l) & \left[e^{2\pi i \delta_{6H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{6} + \delta_{6H}(2)\right)l\right)} \right. \\
& + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{2}{6} + \delta_{6H}(3)\right)l\right)} + e^{2\pi i \left(\left(\frac{3}{6} + \delta_{6H}(1)\right)l\right)} \\
& \left. + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{4}{6} + \delta_{6H}(2)\right)l\right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{5}{6} + \delta_{6H}(3)\right)l\right)} \right] \\
& + f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[e^{2\pi i \varepsilon_{6H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{6} + \varepsilon_{6H}(2)\right)l\right)} \right. \\
& + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{2}{6} + \varepsilon_{6H}(3)\right)l\right)} + e^{2\pi i \left(\left(\frac{3}{6} + \varepsilon_{6H}(1)\right)l\right)} \\
& \left. + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{4}{6} + \varepsilon_{6H}(2)\right)l\right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{5}{6} + \varepsilon_{6H}(3)\right)l\right)} \right] e^{2\pi i \frac{3}{24}l}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Beim Polytyp 6H-SiC ist die ideale Kohlenstoffzelle um $\frac{1}{8}c_{6H}$ gegenüber der idealen Siliziumzelle verschoben. Im folgenden soll zwischen den „fastverbotenen“ Reflexen des Typs I und des Typs II (Tab. 3.4) unterschieden werden. Für Typ I-Reflexe ergibt sich analog zu 4H-SiC für den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe nach der Reihenentwicklung und einigen Vereinfachungen^a:

$$\begin{aligned}
F_{\text{qf}}(hk.l) = 2\pi l f_T^{\text{Si}}(hk.l) & \left[\mp \sqrt{3} (\delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3)) \right. \\
& \left. - i (\delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1)) \right] \\
& + 2\pi l f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[\mp \sqrt{3} (\varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3)) \right. \\
& \left. - i (\varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1)) \right] e^{\frac{1}{4}\pi i l},
\end{aligned} \tag{3.13}$$

wobei beim \mp das Minuszeichen für $l = 2, 8, 14, 20 \dots$ und das Pluszeichen für $l = 4, 10, 16, 22 \dots$ steht. Die Linearkombinationen der Relaxationsparameter werden bei diesem Polytyp substituiert durch:

$$\begin{aligned}
\eta_{6H}(1) &:= \delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3) & \eta_{6H}(2) &:= \delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1) \\
\zeta_{6H}(1) &:= \varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3) & \zeta_{6H}(2) &:= \varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Man erhält nun für den Strukturfaktor:

$$\begin{aligned}
F_{\text{qf}}(hk.l) = 2\pi l f_T^{\text{Si}}(hk.l) & \left[\mp \sqrt{3} \eta_{6H}(1) - i \eta_{6H}(2) \right] \\
& + 2\pi l f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[\mp \sqrt{3} \zeta_{6H}(1) - i \zeta_{6H}(2) \right] e^{\frac{1}{4}\pi i l},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

wobei für das \mp -Zeichen das Gleiche gilt wie bei (3.13). Wird das Quadrat des Absolutbetrags gebildet, so ergibt sich für $l = 2, 22, \dots$ ^b:

^a Eine ausführliche Rechnung ist in Anhang D zu finden.

^b Wie auch beim Polytyp 4H-SiC wird die Absorptionskorrektur $\Delta f''$ vernachlässigt. In Anhang D.4 wird die Absorptionskorrektur berücksichtigt.

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ 3f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \\
&+ 2\sqrt{3}f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \\
&\left. - 2\sqrt{3}f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \right],
\end{aligned} \tag{3.16}$$

für $l = 4, 20 \dots$:

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ 3f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \\
&- 6f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\left. - 2f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \right],
\end{aligned} \tag{3.17}$$

für $l = 8, 16 \dots$:

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ 3f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \\
&+ 6f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\left. + 2f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \right],
\end{aligned} \tag{3.18}$$

und für $l = 10, 14 \dots$:

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ 3f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(1)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \\
&- 2\sqrt{3}f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \\
&\left. + 2\sqrt{3}f_T^{\text{Si}}(hk.l)f_T^{\text{C}}(hk.l)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \right],
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Eine analytische Bestimmung der vier Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ ist aus obigen vier Gleichungen der Regel nicht möglich. Eine analytische Lösung ergibt sich allerdings aus der Kombination von Typ I- und Typ II-Reflexen. Für Typ II Reflexe mit $h - k$

$\neq 3r$, d.h. $h - k = 3r + 1$ oder $h - k = 3r + 2$ ergibt sich für den Strukturfaktor dieser Reflexe nach der linearen Näherung^a:

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = -2\pi i l f_T^{\text{Si}}(hk.l) [\delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1)] - 2\pi i l f_T^{\text{C}}(hk.l) [\varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1)] e^{\frac{1}{4}\pi i l} \quad (3.20)$$

Mit den Substitutionen aus (3.15) ergibt sich:

$$F_{\text{qf}}(hk.l) = -2\pi i l \left[f_T^{\text{Si}}(hk.l) \eta_{6H}(2) + f_T^{\text{C}}(hk.l) \zeta_{6H}(2) e^{\frac{1}{4}\pi i l} \right] \quad (3.21)$$

Aus (3.21) lässt sich das Quadrat des Absolutbetrages des Strukturfaktors bestimmen. Man erhält für $l = 6, 18, 30, 42, \dots$ ^b:

$$\left| F_{\text{qf}}(hk.l) \right|^2 = 4\pi^2 l^2 \left[f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \right] \quad (3.22)$$

für $l = 12, 36, \dots$:

$$\begin{aligned} \left| F_{\text{qf}}(hk.l) \right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\ &\left[f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) f_T^{\text{C}}(hk.l) \eta_{6H}(2) \zeta_{6H}(2) \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

und für $l = 24, 48, \dots$:

$$\begin{aligned} \left| F_{\text{qf}}(hk.l) \right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\ &\left[f_T^{\text{Si}}(hk.l)^2 \eta_{6H}(2)^2 + f_T^{\text{C}}(hk.l)^2 \zeta_{6H}(2)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) f_T^{\text{C}}(hk.l) \eta_{6H}(2) \zeta_{6H}(2) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Aus den „fastverbotenen“ Reflexen des Typs I und des Typs II zusammen lassen sich die Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ analytisch bestimmen. Zuerst können $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(2)$ aus den Gleichungen (3.22) – (3.24) in einem Verfahren analog zu 4H-SiC ermittelt werden. Werden diese in die Gleichungen des Typs I ((3.16)–(3.19)) eingesetzt, lassen sich die zwei verbleibenden Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\zeta_{6H}(1)$ ebenfalls analog zu 4H-SiC bestimmen. Allerdings ist auch bei 6H-SiC eine eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter nur mit zusätzlichen Phaseninformationen möglich (siehe Kap. 5). Auch hier erhält man zwei Lösungen, die sich lediglich im Vorzeichen unterscheiden. Analog zu 4H-SiC benötigt man mindestens drei Typ II-Reflexe um $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ zu bestimmen, da sich die Lösungsgraphen von zwei Reflexen in vier Punkten schneiden. Zur analytischen Lösung

^a Siehe Anhang D

^b Für die Gleichungen mit Absorptionskorrektur sei auf Anhang D.4 verwiesen.

des Gleichungssystems sollte der eine Reflex (3.23) und der andere (3.24) genügen, um einen Schnittwinkel nahe 90° der Graphen und damit eine günstige Fehlerfortpflanzung zu erhalten. Auch zur Bestimmung von $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ benötigt man aus den oben genannten Gründen mindestens drei Typ I-Reflexe. Aus den Relaxationsparametern $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ lassen sich folgende, analog zu 4H-SiC, wichtige und anschauliche Strukturgrößen ermitteln (Abb. 3.5). Die relative Änderung der Dicke der Silizium-Kohlenstoff-Doppellage bezogen auf die Siliziumatome :

$$\frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(j)}{d_0^{6H}} = \frac{d_{6H}^{\text{Si}}(j) - \frac{1}{4}c_{4H}}{\frac{1}{6}c_{4H}} = 6[\delta(j+1) - \delta(j)], \quad (3.25)$$

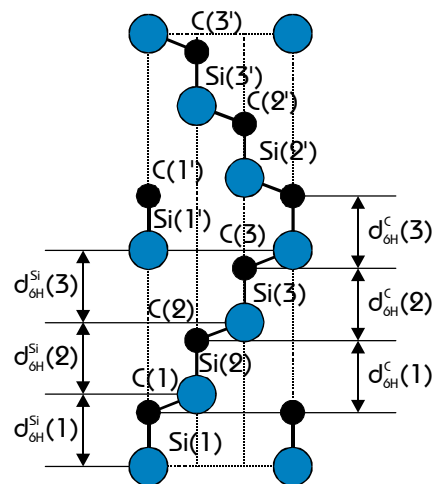
Mit $d_0^{6H} = \frac{1}{6}c_{6H}$ und den Substitutionen (3.14) gilt für Silizium:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(1)}{d_0^{6H}} &= 3[\eta_{6H}(1) + \eta_{6H}(2)], & \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(2)}{d_0^{6H}} &= -6\eta_{6H}(1) \\ \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(3)}{d_0^{6H}} &= 3[\eta_{6H}(1) - \eta_{6H}(2)] \end{aligned} \quad (3.26)$$

Die Kohlenstoffparameter werden erhalten, indem in (3.25) und (3.26) $\delta_{6H}(j)$ durch $\epsilon_{6H}(j)$, und $\eta_{6H}(j)$ durch $\zeta_{6H}(j)$ ersetzt werden.

Aus diesen Größen lassen sich ebenfalls analog zu 4H-SiC noch weitere Strukturparameter ableiten. Eine ausführliche Diskussion dieser Parameter findet in Kapitel 7 statt.

Abb. 3.5: Elementarzelle von 6H-SiC: $d_{6H}^{\text{Si}}(j)$ bezeichnet die Dicke einer Si-C-Doppellage vom j -ten bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom, $d_{6H}^{\text{C}}(j)$ vom j -ten bis zum $(j+1)$ -ten Kohlenstoffatom



3.4 Einfluss der Temperaturfaktoren

Im Folgenden soll der Einfluss von Temperaturfaktoren (DEBYE-WALLER-Faktoren) auf den Strukturfaktor von „fastverbotenen“ Reflexen diskutiert werden. Die Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe würden auch dann von Null verschieden sein, wenn sich die Silizium- bzw. die Kohlenstoffatome auf den idealen Positionen ($\delta_{nH}(j) = \varepsilon_{nH}(j) \equiv 0$) befänden, aber die einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome in der Elementarzelle eine unterschiedliche thermische Auslenkung besäßen. Da die DEBYE-Temperatur bei Siliziumkarbid mit etwa 1200 K recht hoch ist (KERN *et al.* (1969), SLACK (1964)), kann man erwarten, dass die Temperaturfaktoren klein und Abweichung der einzelnen Atome einer Sorte von einem mittleren Auslenkungsfaktor noch kleiner sind. In Tab. 3.6 sind die mittleren Temperaturfaktoren B_{xx} des Polytypes 6H-SiC für Silizium- und Kohlenstoff parallel und senkrecht zur c -Richtung aufgeführt. Bei GOMES DE MESQUITA (GOMES DE MESQUITA (1967)) und BRAM (BRAM (1990)) handelt es sich um experimentelle Werte, die im Rahmen einer Strukturverfeinerung gewonnen wurden, bei ZYWIETZ (ZYWIETZ *et al.* (1996)) um ein theoretisches Modell. Bei dem Modell nach ZYWIETZ lagen die Unterschiede der Temperaturfaktoren senkrecht und parallel zur c -Richtung unter einem Prozent, deshalb wird ein gemeinsamer Wert für beide Richtungen angegeben. Da sich die Atome senkrecht zur c -Richtung auf äquivalenten Gitterplätzen befinden, sind unterschiedliche Temperaturfaktoren der einzelnen Si- oder C-Atome in diese Richtung unwahrscheinlich. ZYWIETZ *et al.* berechneten ebenfalls Temperaturfaktoren für 4H-SiC. Diese unterscheiden sich nur minimal ($< 2\%$) von denen des Polytyps 6H, so dass sie als identisch angenommen werden können. Da nur Abweichungen parallel zur c -Richtung von Interesse sind, soll sich die weitere Betrachtung auf „fastverbotene“ 00. l Reflexe des Polytyps 4H-SiC (für 6H-SiC gilt Äquivalentes) beschränken. Für den Temperaturfaktor in c -Richtung des j -ten Si- bzw. des j -ten C-Atoms in der Elementarzelle soll gelten:

$$B_{33}^X(j) = \bar{B}_{33}^X + \Delta B_{33}^X(j), \quad (3.27)$$

wobei \bar{B}_{33}^X der Mittelwert der Temperaturfaktoren einer Atomsorte in c -Richtung und $\Delta B_{33}^X(j)$ die Abweichung des j -ten Atoms von diesem Mittelwert ist.

Tab. 3.6: Temperaturfaktoren \bar{B}_{yy}^X ($\parallel c$: $yy = 33$, $\perp c$: $yy = 11$) für 6H-SiC bei Raumtemperatur nach GOMES DE MESQUITA (*least-squares* Verfahren), BRAM und ZYWIETZ *et al.*.

		GOMES D. M.	BRAM	ZYWIETZ <i>et al.</i>
Si	$\parallel c [\text{\AA}^2]$	0.2378	0.2066	0.211
	$\perp c [\text{\AA}^2]$	0.2704	0.2117	
C	$\parallel c [\text{\AA}^2]$	0.2743	0.2501	0.257
	$\perp c [\text{\AA}^2]$	0.3358	0.2659	

Für den Strukturfaktor $F_{\text{qf}}^{\text{DW}}$ ergibt sich unter Berücksichtigung der Äquivalenz der oberen mit der unteren Hälfte der Elementarzelle^a:

$$F_{\text{qf}}^{\text{DW}}(hk.l) = 2f_{\text{Si}}(hk.l)e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{Si}} l^2}{4c_{4H}^2}} \left[e^{-\frac{\Delta B_{33}^{\text{Si}}(1) l^2}{4c_{4H}^2}} e^{2\pi i \delta_{4H}(1)l} + e^{-\frac{\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) l^2}{4c_{4H}^2}} e^{2\pi i l(\frac{1}{4} + \delta_{4H}(2))} \right] \\ + 2f_{\text{C}}(hk.l)e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{C}} l^2}{4c_{4H}^2}} \left[e^{-\frac{\Delta B_{33}^{\text{C}}(1) l^2}{4c_{4H}^2}} e^{2\pi i \varepsilon_{4H}(1)l} + e^{-\frac{\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) l^2}{4c_{4H}^2}} e^{2\pi i l(\frac{1}{6} + \varepsilon_{4H}(2))} \right] e^{\frac{3}{8}\pi i l} \quad (3.28)$$

Da die Abweichungen $\Delta B_{33}^X(j)$ vom Mittelwert klein sind, lässt sich der Strukturfaktor, analog den Relaxationsparametern, nach den Abweichungen $\Delta B_{33}^X(1)$ und $\Delta B_{33}^X(2)$ entwickeln, und man erhält mit den Substitutionen aus (3.6) und $\Delta B_{33}^X(1) + \Delta B_{33}^X(2) = 0$ unter Vernachlässigung aller höheren Ordnungen außer der ersten:

$$F_{\text{qf}}^{\text{DW}}(hk.l) = f_{\text{Si}}(hk.l)e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{Si}} l^2}{4c_{4H}^2}} \left[4\pi i l \eta_{4H} + \frac{l^2}{c_{4H}^2} \Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) \right] \\ + f_{\text{C}}(hk.l)e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{C}} l^2}{4c_{4H}^2}} \left[4\pi i l \zeta_{4H} + \frac{l^2}{c_{4H}^2} \Delta B_{33}^{\text{C}}(2) \right] e^{\frac{3}{8}\pi i l} \quad (3.29)$$

Bildet man das Betragsquadrat von (3.29) analog zu (3.8) und (3.9), so erhält man vier verschiedene Gleichungen für verschiedene MILLER-Indizes l^b .

$$\left| F_{\text{qf}}^{\text{DW}}(hk.l) \right|^2 = f_{\text{Si}}(hk.l)^2 e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{Si}} l^2}{2c_{4H}^2}} \left[16\pi^2 l^2 \eta_{4H}^2 + \frac{l^4}{c_{4H}^4} \Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)^2 \right] \\ + f_{\text{C}}(hk.l)^2 e^{-\frac{\bar{B}_{33}^{\text{C}} l^2}{2c_{4H}^2}} \left[16\pi^2 l^2 \zeta_{4H}^2 + \frac{l^4}{c_{4H}^4} \Delta B_{33}^{\text{C}}(2)^2 \right] \\ + f_{\text{Si}}(hk.l) f_{\text{C}}(hk.l) e^{-\frac{(\bar{B}_{33}^{\text{C}} + \bar{B}_{33}^{\text{Si}}) l^2}{4c_{4H}^2}} \times \quad (3.30) \\ \left[\mp 16\sqrt{2}\pi^2 l^2 \eta_{4H} \zeta_{4H} \mp \frac{\sqrt{2}}{c_{4H}^4} l^4 \Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) \Delta B_{33}^{\text{C}}(2) \right. \\ \left. \pm \frac{4\sqrt{2}}{c_{4H}^4} \pi l^3 \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) \eta_{4H} - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) \zeta_{4H} \right) \right]$$

Für $l = 2, 30 \dots$ gelten in den letzten zwei Zeilen von (3.30) für \pm bzw. \mp die oberen Vorzeichen also in der vorletzten Zeile zweimal Minus und in der letzten Zeile Plus, für $l = 6, 26 \dots$ in der vorletzten Zeile die unteren (+) und in der letzten (+), für $l = 10, 22 \dots$ in der vorletzten Zeile zwei Mal (+) und dann (−) und für $l = 14, 18 \dots$ in der vorletzten und in der letzten Zeile die Minuszeichen.

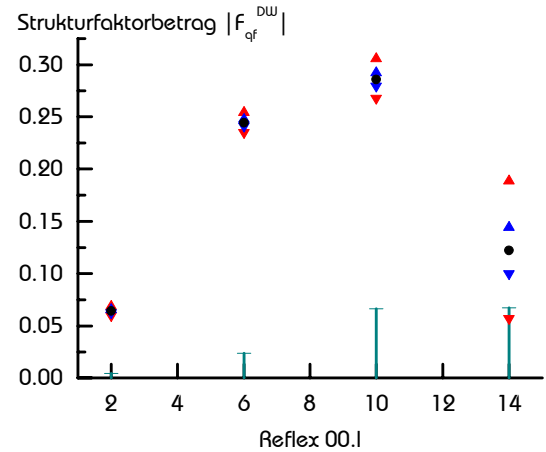
^a Der Einfluss der Dispersionskorrekturen $\Delta f'$ und $\Delta f''$ wird hier der besseren Übersichtlichkeit wegen vernachlässigt.

^b Der Strukturfaktor für 6H-SiC findet sich in Anhang D.

Nach den Berechnungen von ZYWIETZ *et al.* sind die Abweichungen $\Delta B_{33}^x(j)$ vom Mittelwert \bar{B}_{33}^x kleiner als ein Prozent, aus den Ergebnissen von BRAM ergeben sich Abweichungen zwischen zwei und drei Prozent. In Abb. 3.6 ist der Einfluss dieser Temperaturfaktoren an einem konkreten Beispiel gezeigt. Als Ausgangsmodell wurden die Relaxationsparameter nach KÄCKELL gewählt (s. Kap. 3.2.1.2). Nimmt man für die Temperaturfaktoren an, dass sie nicht mehr als drei Prozent von ihrem Mittelwert abweichen, liegen die Strukturfaktoren der einzelnen „fastverbotenen“ Reflexe innerhalb der roten Dreiecke, bei einer Abweichung von maximal einem Prozent innerhalb der blauen. Deutlich zu erkennen ist, dass der Einfluss der Temperaturfaktoren zu höher indizierten Reflexen zunimmt, was auf ihre quadratische Abhängigkeit von l zurückzuführen ist. Zusätzlich zeigt Abb. 3.6 den Einfluss der Temperaturfaktoren auf den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe für die idealen Atomlagen ($\delta_{6H}(j) = \varepsilon_{6H}(j) \equiv 0$) bei einer Abweichung der Temperaturfaktoren der einzelnen Atome vom Mittelwert von bis zu drei Prozent (blau-grüne Linien). Aus Abb. 3.6 geht hervor, dass deutlich unterschieden werden kann, ob die nicht verschwindenden Strukturfaktorbeträge der „fastverbotenen“ Reflexe durch atomare Relaxationen oder nur durch unterschiedliche thermische Auslenkungen der einzelnen Atome in der Elementarzelle verursacht werden. Um den Einfluss der Temperaturfaktoren gering zu halten scheint die Verwendung niedrig indexierter Reflexe zur Bestimmung der Relaxationsparameter geeigneter zu sein.

Für den Polytypen 6H-SiC lassen sich ähnliche Überlegungen anstellen. Es ist zu erwarten, dass sich der Einfluss der Temperaturfaktoren bei diesem Polytyp aufgrund der ähnlichen Kristallstruktur nicht wesentlich von dem des Polytyps 4H-SiC unterscheidet.

Abb. 3.6: Einfluss von Temperaturfaktoren auf $|F_{\text{qf}}^{\text{DW}}|$ von 4H-SiC 00.l Reflexen. Schwarzen Punkte: $|F_{\text{qf}}^{\text{DW}}|$ des Modells KÄCKELL mit den Temperaturfaktoren von ZYWIETZ *et al.* und $\Delta B_{33}^x(j) \equiv 0$. Dreiecke: jeweils obere und untere Grenze für folgende Modelle: blau: obiges Modell, aber $\Delta B_{33}^x(j)/B_{33}^x < 1\%$, rot: obiges Modell, aber $\Delta B_{33}^x(j)/B_{33}^x < 3\%$. Blau-grüne Linie: $\Delta B_{33}^x(j)/B_{33}^x < 3\%$, aber $\delta_{6H}(j) = \varepsilon_{6H}(j) \equiv 0$, also keine Relaxationen.



4 Eindeutige Bestimmung der Verfeinerungsparameter

In diesem Kapitel wird eine Methode vorgestellt, die es erlaubt, die Verfeinerungsparameter unzweideutig zu bestimmen. Mittels eines qualitativen Vergleiches von gemessenen Mehrstrahlprofilen mit berechneten können die Mehrdeutigkeiten beseitigt werden.

4.1 Mehrdeutigkeiten

Im vorangegangenen Kapitel 3 wurde dargestellt, dass die Lösung der Gleichungssysteme zur Bestimmung der Verfeinerungsparameter $\eta_{nH}(j)$ und $\zeta_{nH}(j)$ nicht eindeutig ist. Diese Mehrdeutigkeiten treten bei der Bestimmung der Relaxationsparameter aus den Absolutbeträgen der Struktur Faktoren von „fastverbotenen“ Reflexen auf, da der Strukturfaktor für das unrelaxierte Gitter verschwindet.

Bei 4H-SiC gibt es zwei verschiedene Lösungen, $+1_{4H}$ und -1_{4H} , die sich nur im Vorzeichen unterscheiden, wie an den zwei unterschiedlichen Schnittpunkten der Lösungsellipsen in Abb. 3.3 deutlich zu sehen ist. Der Strukturfaktor für „fastverbotene“ 4H-SiC Reflexe (3.7) soll hier nochmals gezeigt werden:

$$F_{\text{qt}}(hk.l) = 4\pi i l f_T^{\text{Si}}(hk.l) \eta_{4H} + 4\pi i l f_T^{\text{C}}(hk.l) \zeta_{4H} e^{\frac{3}{8}\pi i l} \quad (4.1)$$

Da der Strukturfaktor die Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} linear enthält, wird sofort ersichtlich, dass mit dem Vorzeichenwechsel dieser Parameter auch das Vorzeichen des Real- und Imaginärteiles wechselt und daher zwischen den Modellen $+1_{4H}$ und -1_{4H} eine Phasendifferenz von 180° besteht, das Betragsquadrat $|F_{\text{qt}}(hk.l)|^2$ jedoch unverändert bleibt.

Bezogen auf die Änderung der Dicke der Doppellage $\Delta d_{4H}^{\text{Si}}(j)$ (Abb. 3.4, (3.10), (3.11)) gilt folgendes^a: Da $d_{4H}^{\text{Si}}(1) + d_{4H}^{\text{Si}}(2) = \frac{1}{2} c_{4H}$, ist eine Stauchung der ersten Doppellage gleichbedeu-

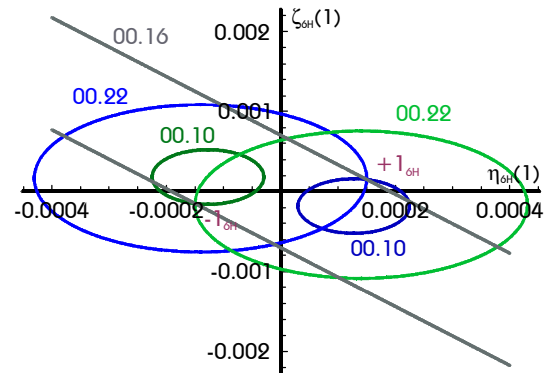
^a Für Δd_{4H}^{C} gilt Äquivalentes.

tend einer Streckung der zweiten, d.h. bei der Unterscheidung zwischen Modell $+1_{4H}$ und -1_{4H} wird ermittelt, welche Doppellage gestreckt und welche gestaucht ist.

Werden bei $6H$ -SiC sowohl „fastverbotene“ Typ I- als auch Typ II-Reflexe zur Strukturverfeinerung des Polytyps herangezogen, ergeben sich ebenfalls zwei zu unterscheidende Modelle^a. Dies lässt sich folgendermaßen begründen:

- Der Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Typ II-Reflexe (3.21) beinhaltet nur $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$, hingegen nicht $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$. Analog zu $4H$ -SiC lassen sich diese beiden Relaxationsparameter bis auf ihr Vorzeichen bestimmen. Man erhält hieraus zwei Modelle. Die Phasendifferenz des Strukturfaktors der Typ II-Reflexe beträgt zwischen diesen Modellen 180° .
- Setzt man $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ in die Gleichungen (3.16) – (3.19) der Typ I-Reflexe ein, lassen sich die verbleibenden Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ ermitteln. Für Typ I-Reflexe mit $l = 4, 20, \dots$ und $l = 8, 16, \dots$ ist die Lösungsmenge – unter Vernachlässigung der Absorptionskorrektur – identisch für die beiden Vorzeichenvarianten der aus den Typ II Reflexen erhaltenen Lösungen von $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$. Für $l = 2, 22, \dots$ und $l = 10, 14, \dots$ unterscheiden sich die Lösungselipsen je nachdem, welche der beiden Vorzeichenvarianten von $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ verwendet wird, durch eine Punktspiegelung am Ursprung (Abb. 4.1). Durch Verwendung von Typ I- und Typ II-Reflexen bei der Strukturverfeinerung mit „fastverbotenen“ Reflexen erhält man zwei Lösungssätze für die Parameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$, die nur im Vorzeichen verschieden sind. Diese Modelle sollen im folgenden $+1_{6H}$, und -1_{6H} genannt werden.

Abb. 4.1: Lösungen für $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ aus $6H$ -SiC Typ I Reflexen bei vorgegebenen $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ aus dem Modell KÄCKELL für die Reflexe 00.10 und 00.22. blau: $\eta_{6H}(2) = -0.9 \cdot 10^{-4}$, $\zeta_{6H}(2) = -7.7 \cdot 10^{-4}$; grün: umgekehrte Vorzeichen ($\eta_{6H}(2) = 0.9 \cdot 10^{-4}$, $\zeta_{6H}(2) = 7.7 \cdot 10^{-4}$). Der Reflex 00.16 (grau) verhält sich unabhängig vom Vorzeichen von $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$. Die gemeinsame Lösung dieser Reflexe ist mit $+1_{6H}$ für das blaue bzw. mit -1_{6H} für das grüne Modell gekennzeichnet.



^a Würden nur Typ I Reflexe zur Strukturverfeinerung herangezogen, ergäben sich sechs unterschiedliche Modelle (-1_{6H} , -2_{6H} , -3_{6H} , $+1_{6H}$, $+2_{6H}$ und $+3_{6H}$), die zum einem auf den Vorzeichenwechsel und zum anderen darauf zurückzuführen ist, dass eine zyklische Vertauschung der Relaxationsparameter $\delta_{6H}(j)$ bzw. $\epsilon_{6H}(j)$ zum gleichen Absolutbetrag des Strukturfaktors der Typ I Reflexe führt. Dieser Sachverhalt wird ausführlich in BAUER *et al.* (2001) diskutiert.

Auch bei 6H-SiC lassen sich aus der eindeutigen Bestimmung des Relaxationsmodells, also der Unterscheidung zwischen den Modellen $+1_{6H}$, und -1_{6H} , Rückschlüsse auf die Dicke der Doppellagen $d_{6H}^X(j)$ ($X = \text{C, Si}$) (Abb. 3.5) und des Unterschiedes der Si-C-Bindungslänge zwischen der hexagonalen und der kubischen Umgebung oder den zwei kubischen Umgebungen in der Elementarzelle schließen. Eine ausführliche Diskussion findet sich in Kap. 7.

Zusammenfassend gibt es sowohl für den Polytyp 4H-, als auch für 6H-SiC jeweils zwei verschiedene Relaxationsmodelle, die sich nur im Vorzeichen der Relaxationsparameter $\eta_{nH}(j)$ und $\zeta_{nH}(j)$ unterscheiden. Die Phasendifferenz zwischen den zwei Modellen $+1_{nH}$ und -1_{nH} beträgt 180° . Demnach lässt sich die eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter auf ein Phasenproblem zurückführen. Zur Lösung bietet sich die Untersuchung von Mehrstrahlfällen von „fastverbotenen“ Reflexen an.

Die Mehrstrahlmethode hat gegenüber den anderen Methoden (WOOLFSON & FAN (1995)) zur Phasenbestimmung, wie z.B. der *Trail-and-Error*-Methode oder dem PATTERSON-Verfahren, den Vorteil, dass sie keine numerische, sondern eine physikalische Methode ist. Die Methode der anomalen Dispersion ist bei Siliziumkarbid nicht anwendbar, da die K-Kanten von Silizium (1839 eV) und Kohlenstoff (284 eV) zu niederenergetisch sind.

4.2 Mehrstrahlfälle

4.2.1 Einführung

Ein Mehrstrahlfall (CHANG (1984), COLELLA (1992)) liegt dann vor, wenn mehrere Reflexe gleichzeitig der BRAGG-Bedingung genügen. Dieses Phänomen wurde erstmals 1937 von M. RENNINGER (RENNINGER (1937)) bei Messungen an dem fast ausgelöschten 222 Reflex der Diamantstruktur beobachtet und als Umwegenregung bezeichnet. Mehrstrahlfälle können realisiert werden durch Drehung des Kristalls um die Netzebenenormalen des zugrundeliegenden Zweistrahlfalls – im Folgenden primärer Reflex **H** genannt – bei gültiger BRAGG-Bedingung. Während dieser Drehung – die im Folgenden als ψ -scan bezeichnet wird – passieren im Allgemeinen mehrere reziproke Gitterpunkte die EWALD-Sphäre. In einfachsten Fall wird nur ein weiterer Reflex – im Folgenden sekundärer Reflex **L** genannt – gleichzeitig angeregt. Es liegt dann ein Dreistrahlfall vor. Abb. 4.2 illustriert einen solchen Dreistrahlfall am Beispiel des „fastverbotenen“ 6H-SiC Reflexes 00.2 im realen und im reziproken Raum anhand der EWALD-Konstruktion. Zusätzlich zum primären Reflex **H** (hier 00.2) befindet sich der sekundäre Reflex **L** ($1\bar{1}.3$) auf der Oberfläche der EWALD-Kugel. Ist die BRAGG-Bedingung für die Reflexe **H** und **L** erfüllt, ist automatisch auch ein dritter Reflex, **H-L** ($\bar{1}1.5$), in Reflexionsstellung. Die gebeugte Welle dieses Reflexes propagiert in die gleiche Richtung wie die des primären Reflexes **H**. Dies bedeutet, dass dem Strahl außer dem direkten Weg $\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_H$ auch der „Umweg“ $\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_L \rightarrow \mathbf{k}_H$ offen steht (LAUE (1960)).

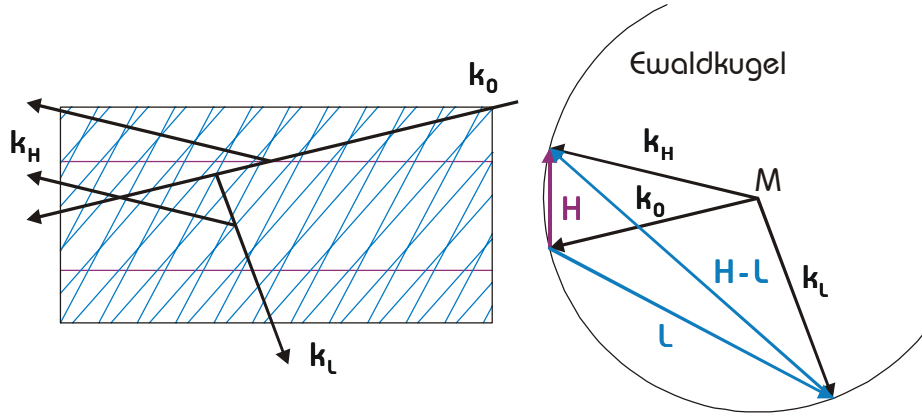


Abb. 4.2: Dreistrahlfall am Beispiel von 6H-SiC (**H**: 00.2, sekundärer Reflex **L**: $1\bar{1}.3$, $\lambda = 0.3537$ nm). Links: Dreistrahlfall im realen Raum. Rechts: Dreistrahlfall im reziproken Raum (EWALD-Konstruktion). \mathbf{k}_0 erfüllt die BRAGG-Bedingung gleichzeitig für zwei Netzebenenscharen, (00.2) und ($1\bar{1}.3$). Zur vereinfachten Darstellung wurde der koplanare Spezialfall gewählt.

Dies wird aus folgenden Gleichungen deutlich:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{H} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_H \\ \mathbf{L} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_L \end{array} \right\} \Rightarrow \mathbf{H} - \mathbf{L} = \mathbf{k}_L - \mathbf{k}_H \quad (4.2)$$

\mathbf{k}_0 stellt den Wellenvektor des einfallenden, \mathbf{k}_H , \mathbf{k}_L die Wellenvektoren der gebeugten Wellen dar. Die direkt gebeugte Welle und die Umwegwelle überlagern sich kohärent und interferieren miteinander. Die resultierende Intensität hängt vom Kosinus der Phasendifferenz der beiden Wellen ab (4.3).

$$|A_{\text{res}}|^2 = |A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}|^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1 A_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \quad (4.3)$$

A_1 , A_2 sind die Amplituden kohärenter Wellen, φ_1 , φ_2 die dazugehörigen Phasen, A_{res} die resultierende Amplitude. Der Interferenzkontrast beinhaltet Informationen der Phasendifferenz der interferierenden Wellen.

Im Dreistrahlfall entspricht die Phase der ersten Welle der Phase φ_H des Strukturfaktors $F(\mathbf{H})$, die Phase der zweiten Welle der Summe der Phasen der Strukturfaktoren $F(\mathbf{L})$ und $F(\mathbf{H}-\mathbf{L})$ $\varphi_L + \varphi_{H-L}$, da sich ihre Amplitude nach zweimaliger Beugung aus dem Produkt der Strukturfaktoren $F(\mathbf{L})F(\mathbf{H}-\mathbf{L})$ ergibt (WECKERT & HÜMMER (1997)). Die resultierende Amplitude, und damit auch die Intensität, der in \mathbf{k}_H Richtung gebeugten Welle hängt von dem Phasentriplett φ_3 ab:

$$\varphi_3 = \varphi_L + \varphi_{H-L} - \varphi_H \quad (4.4)$$

φ_3 ist, im Gegensatz zu den Phasen der einzelnen Strukturfaktoren, eine strukturinvariante Größe, da die reziproken Gittervektoren ein geschlossenes Dreieck bilden, d h. es gilt:

$(\mathbf{L} + (\mathbf{H} - \mathbf{L}) - \mathbf{H} = 0)$ (Abb. 4.2)^a. Eine Größe ist dann strukturinvariant, wenn sie unabhängig von einem willkürlich gewählten Koordinatenursprung in der Elementarzelle ist.

Ist \mathbf{H} ein „fastverbotener“ Reflex und sind \mathbf{L} und $\mathbf{H}-\mathbf{L}$ starke Reflexe, so hängt die Phase nur von \mathbf{H} , $\varphi_{\mathbf{H}}$, von den Relaxationsparametern ab. Die Strukturfaktoren und die Phasen der starken Reflexe \mathbf{L} und $\mathbf{H}-\mathbf{L}$ sind praktisch unabhängig vom Verfeinerungsmodell, da sich die sehr kleinen Änderungen der Atompositionen von den Ideallagen nicht wesentlich auf den Strukturfaktor auswirken. Da bei den zu unterscheidenden Modellen $+1_{nH}$ und -1_{nH} von $4H$ - bzw. $6H$ -SiC die Differenz der Phasen 180° beträgt, gilt dies auch für φ_3 .

Während der Drehung um die Netzebenennormalen des primären Reflexes \mathbf{H} (ψ -scan) bleibt die Intensität solange konstant, bis der sekundäre Reflex \mathbf{L} durch die EWALD-Kugel läuft. In der Nähe des Dreistrahlalles steigen die Amplituden und damit auch die Intensitäten der durch \mathbf{L} angeregten Welle und der „Umweg“-Welle. Diese zwei Intensitäten erreichen ihr Maximum, wenn \mathbf{L} genau auf der EWALD-Kugel liegt. Es liegt eine Resonanzerscheinung vor. Beim Durchgang durch die Resonanz findet eine Phasenänderung $\Delta(\psi)$ von 180° statt. Durchquert der reziproke Gittervektor \mathbf{L} die Ewald-Sphäre von innerhalb nach außerhalb – im Folgenden mit $in \rightarrow out$ bezeichnet – ändert sich $\Delta(\psi)$ von 0° nach 180° , im entgegengesetzten Fall ($out \rightarrow in$) von 180° nach 0° (WECKERT & HÜMMER (1997)). Für $\Delta(\psi)$ gilt nach WOOLFSON & FAN (1995) in der Näherung nach ROSSMANITH (1998, 2000):

$$\Delta(\psi) = \frac{\pi}{2} + \arctan \left[\pm \frac{\Delta\psi}{w} \right], \quad (4.5)$$

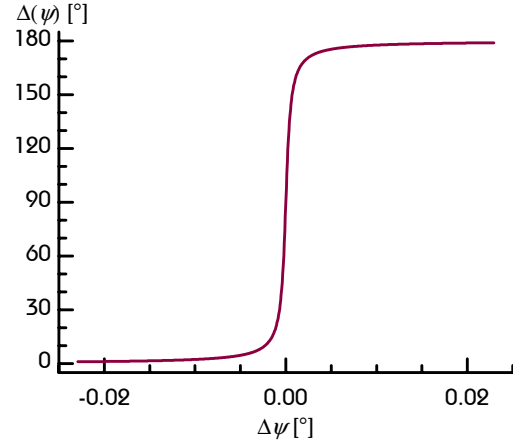
wobei in der Näherung w als Halbwertsbreite des Dreistrahl-Peaks angenommen werden kann und (+) für einen $in \rightarrow out$ Fall gilt und (–) für einen $out \rightarrow in$ Fall. Der Verlauf von $\Delta(\psi)$ nach (4.5) in der Nähe des Dreistrahlalles ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die totale Phasendifferenz $\varphi_{\text{tot}}(\psi)$ zwischen der primären Welle und der „Umweg“-Welle beträgt demnach:

$$\varphi_{\text{tot}}(\psi) = \varphi_3 + \Delta(\psi) \quad (4.6)$$

Aus (4.6) folgt eine Abhängigkeit der Dreistrahlinterferenzprofile vom $\cos(\varphi_3 + \Delta\psi)$ (HÜMMER & WECKERT (1995)). Angenommen die Tripletphase φ_3 sei 0, so ändert sich die Gesamtphase $\varphi_{\text{tot}}(\psi)$ beim Durchgang von \mathbf{L} durch die EWALD-Sphäre von 0° nach 180° ($in \rightarrow out$ Fall). Entsprechend des Verlaufs der Kosinusfunktion ist die Interferenz der Umweg- mit der Zweistrahlwelle zunächst konstruktiv ($\cos(\varphi_{\text{tot}}) > 0$ für $\varphi_{\text{tot}} < 90^\circ$), nach Durchlaufen des Dreistrahlalles destruktiv ($\cos(\varphi_{\text{tot}}) < 0$ für $\varphi_{\text{tot}} > 90^\circ$). Für einen $out \rightarrow in$ Fall gilt das entgegengesetzte Verhalten. Für andere Werte von φ_3 lässt sich die Interferenz entsprechend bestimmen (WECKERT & HÜMMER (1997)).

^a Allgemein gilt: $\prod_{j=1}^m F(\mathbf{H}_j)$ ist strukturinvariant, wenn $\sum_{j=1}^m \mathbf{H}_j = 0$.

Abb. 4.3: Resonanzphase $\Delta(\psi)$ in der Umgebung des Dreistrahlalles. Bei $\Delta\psi = 0$ durchquert der reziproke Gittervektor \mathbf{L} des sekundären Reflexes die EWALD-Sphäre (*in* \rightarrow *out* Fall).



Die grundlegende Idee zur phasenempfindlichen Röntgenbeugung wurde erstmalig von LIPSCOMP (1949) veröffentlicht und findet zahlreiche Anwendungen, besonders zur Aufklärung von enantiomorphen Strukturen (HÜMMER & BILLY (1986), HÜMMER *et al.* (1989), COLLELLA (1995), SHEN *et al.* (2000)) und wird auch in der Röntgentopographie verwendet (HEYROTH (2000), HEYROTH *et al.* (2001)), um nur einige zu nennen.

4.2.2 Azimutale Position der Mehrstrahlfälle

Für die eindeutige Identifizierung der Umwegreflexe ist es notwendig, ihre genaue azimutale Lage zu kennen. Bei der Drehung um die Netzebenenormalen des primären Reflexes \mathbf{H} , wobei dieser die BRAGG-Bedingung erfüllt, läuft der Wellenvektor des einfallenden Strahles \mathbf{k}_0 auf dem Mantel eines Kegels, dem sogenannten KOSSEL-Kegel (LAUE (1960)). Der Öffnungswinkel dieses Kegels beträgt $180^\circ - 2\theta_{\mathbf{H}}$ ($\theta_{\mathbf{H}}$ – BRAGG-Winkel des Reflexes \mathbf{H}) und ist demnach über die BRAGG-Gleichung mit der Wellenlänge der Röntgenstrahlung verknüpft. Allgemein lässt sich so für jeden beliebigen Reflex durch Drehung von \mathbf{k}_0 um seine Netzebenenormalen ein KOSSEL-Kegel konstruieren. Abb. 4.4 zeigt die KOSSEL-Kegel, genauer die Schnittkreise der Kegel mit einer Kugeloberfläche – im folgenden KOSSEL-Kreise genannt – für das 6H-SiC-Gitter für alle bei einer bestimmten Wellenlänge existierenden Reflexe. Am Schnittpunkt zweier KOSSEL-Kreise auf der Kugeloberfläche in Abb. 4.4 ist die BRAGG-Bedingung für beide Reflexe erfüllt, es liegt dann ein Dreistrahlfall vor. Ist der primäre Reflex \mathbf{H} vom Typ 00.l, lassen sich die azimutalen Positionen der Dreistrahlfälle mit Gleichung (4.7) bestimmen:

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} \cos(\psi_{\mathbf{H}}) & -\sin(\psi_{\mathbf{H}}) & 0 \\ \sin(\psi_{\mathbf{H}}) & \cos(\psi_{\mathbf{H}}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta_{\mathbf{H}}) \\ 0 \\ \sin(\theta_{\mathbf{H}}) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha_{\mathbf{HL}}) & 0 & \sin(\alpha_{\mathbf{HL}}) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha_{\mathbf{HL}}) & 0 & \cos(\alpha_{\mathbf{HL}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\psi_{\mathbf{L}}) & -\sin(\psi_{\mathbf{L}}) & 0 \\ \sin(\psi_{\mathbf{L}}) & \cos(\psi_{\mathbf{L}}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta_{\mathbf{L}}) \\ 0 \\ \sin(\theta_{\mathbf{L}}) \end{pmatrix} \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

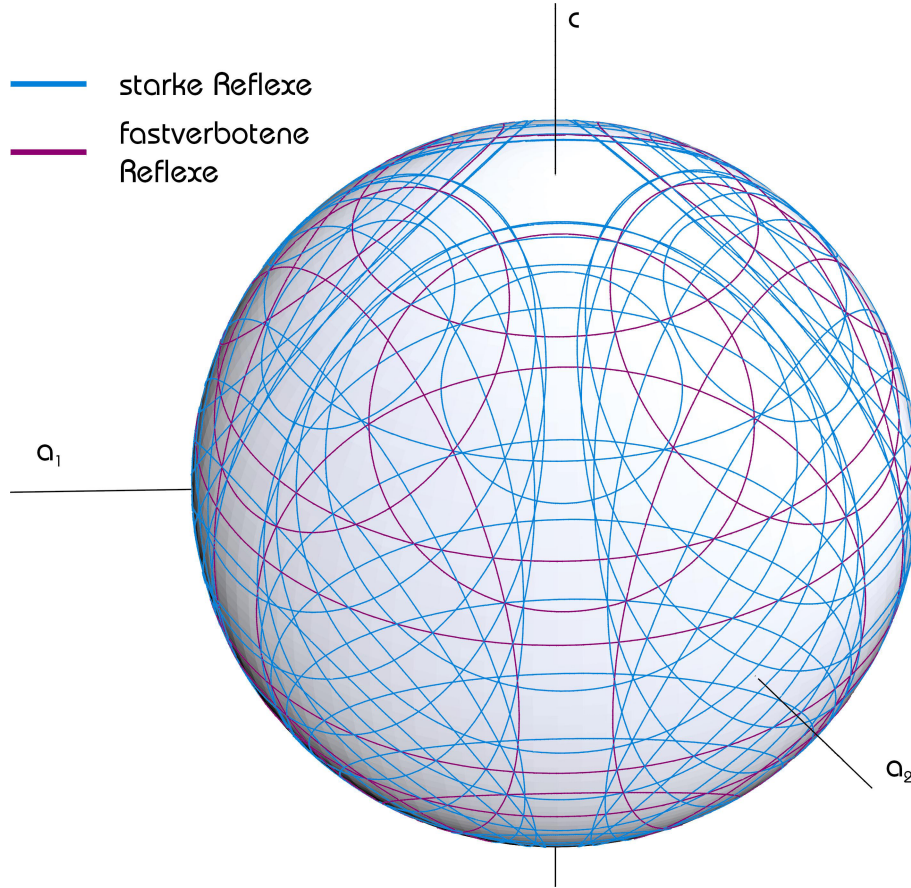


Abb. 4.4: KOSSEL-Kegel für das 6H-SiC Gitter für eine Wellenlänge von 0.32 nm^a . Die Kegel der „fastverbotenen“ Reflexe sind rot, die der starken Reflexe blau dargestellt. Deutlich zu erkennen ist die hexagonale Symmetrie der Struktur. Die hexagonalen Achsen sind mit a_j und c bezeichnet.

Die linke Seite der Gleichung beschreibt einen KOSSEL-Kreis des $00.l$ -Reflexes \mathbf{H} auf der Einheitskugel, die rechte Seite den KOSSEL-Kreis des Reflexes \mathbf{L} . $\alpha_{\mathbf{HL}}$ ist der Winkel zwischen den Netzebenenormalen von \mathbf{H} und \mathbf{L} . $\psi_{\mathbf{H}}$ der azimutale Winkel bei der Drehung um \mathbf{H} , $\psi_{\mathbf{L}}$ der azimutale Winkel bei der Drehung um \mathbf{L} . $\theta_{\mathbf{H}}$ und $\theta_{\mathbf{L}}$ sind die BRAGG-Winkel der beteiligten Reflexe, die die Öffnungswinkel der KOSSEL-Kegel und damit die Radien der KOSSEL-Kreise bestimmen. Die drei Komponenten der beiden Vektoren in (4.7) bilden ein Gleichungssystem, aus dem sich die Azimute der beiden Schnittpunkte bestimmen lassen (ähnlich zu COLE *et al.* (1962)):

$$\psi_{\mathbf{H}} = \psi_0 \pm \arccos \left(\frac{\lambda(d_{\mathbf{H}} - d_{\mathbf{L}} \cos(\alpha_{\mathbf{HL}})) \csc(\alpha_{\mathbf{HL}})}{d_{\mathbf{H}} d_{\mathbf{L}} \sqrt{4 - \frac{\lambda^2}{d_{\mathbf{H}}^2}}} \right) \quad (4.8)$$

^a Die lange Wellenlänge von 0.32 nm wurde aus Darstellungsgründen gewählt. Bei den in dieser Arbeit verwendeten Wellenlängen von ca. 0.15 nm und 0.071 nm wären über 900 bzw. über 9000 Kreise darzustellen.

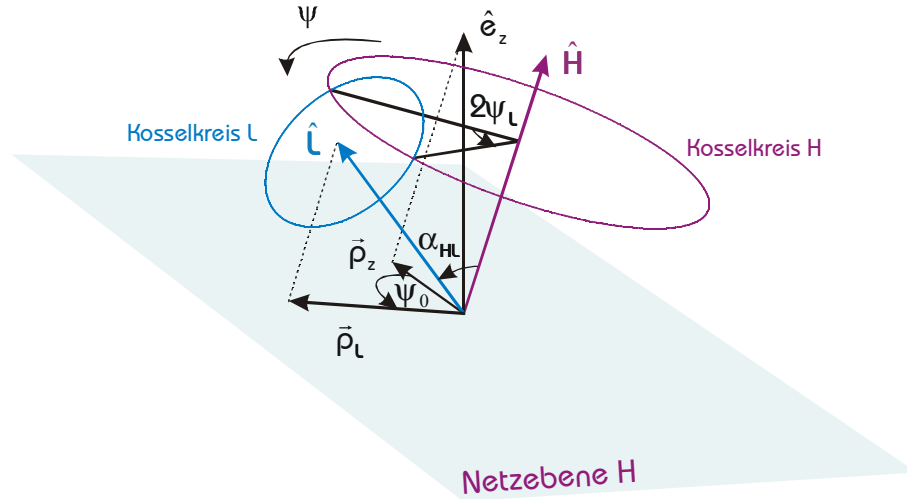


Abb. 4.5: Schnittpunkte zweier KOSSEL-Kreise im allgemeinen Fall (außer $\mathbf{H} = 00.l$). am Beispiel folgender $6H$ -SiC Reflexe $\mathbf{H}:11.2$, $\mathbf{L}:2\bar{3}.11$ und der Wellenlänge $\lambda = 0.154056$ nm.

(4.8) erlaubt die Berechnung der azimuthalen Position der bei einer bestimmten Wellenlänge auftretenden Umwegreflexe. ψ_0 ist der azimuthale Winkel des reziproken Gittervektors \mathbf{L} bezüglich eines gewählten Nullpunktes. Bei $00.l$ Reflexen wird in dieser Arbeit die $[1000]$ -Richtung des hexagonalen Kristallsystems als Bezug gewählt. ψ_0 ist demnach der Winkel zwischen der Projektion des reziproken Gittervektors \mathbf{L} in die $(hki0)$ -Ebene und der $[1000]$ -Richtung. ψ_0 wird folgendermaßen berechnet:

$$\psi_0 = -\text{sgn}(k_L) \arccos\left(\frac{h_L + \frac{1}{2}k_L}{\sqrt{h_L^2 + h_L k_L + k_L^2}}\right), \quad (4.9)$$

wobei h_L und k_L die MILLER-Indizes des Reflexes \mathbf{L} sind. Den allgemeinen Fall, d.h. den eines beliebigen primären Reflexes \mathbf{H} , stellt Abb. 4.5 dar. Gleichung (4.8) bleibt weiterhin gültig, bis auf eine Modifikation des Winkels ψ_0 . Bei primären Reflexen \mathbf{H} , die keine $(00.l)$ Reflexe sind, soll als azimuthaler Bezugspunkt die Projektion des Einheitsvektors in c -Richtung (\hat{e}_z in Abb. 4.5) auf die Netzebene von \mathbf{H} dienen. Es gilt für ψ_0 :

$$\psi_0 = \pm \arccos\left(\frac{\vec{p}_z \cdot \vec{p}_L}{|\vec{p}_z| |\vec{p}_L|}\right) \quad (4.10)$$

In (4.10) ist \vec{p}_z der Projektionsvektor von \hat{e}_z auf die Netzebene des Reflexes \mathbf{H} und \vec{p}_L die Projektion des normierten reziproken Gittervektors $\hat{\mathbf{L}}$ auf diese Netzebene. Da der Arkuskosinus nur von 0° bis 180° definiert ist, wechselt ψ_0 das Vorzeichen, wenn der Winkel zwischen \vec{p}_z und \vec{p}_L in Drehrichtung (gegen den Uhrzeigersinn) größer als 180° wird. Für diese Projektionen gilt:

$$\vec{p}_z = (\hat{e}_z \cdot \hat{\mathbf{H}}) \cdot \hat{\mathbf{H}} - \hat{e}_z, \quad \vec{p}_L = (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{H}}) \cdot \hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{L}}, \quad (4.11)$$

wobei $\hat{\mathbf{H}}$ der normierte reziproke Gittervektor des Reflexes \mathbf{H} ist. $\hat{\mathbf{H}}$ und $\hat{\mathbf{L}}$ werden in (4.11) in kartesischen Koordinaten verwendet. Wird (4.8) nach der Wellenlänge λ aufgelöst, erhält man folgende Gleichung, wobei $\psi = \psi_{\mathbf{H}} - \psi_0$ gilt:

$$\lambda(\psi) = \frac{2d_{\mathbf{H}}d_{\mathbf{L}}\cos(\psi)}{\sqrt{d_{\mathbf{L}}^2\cos^2(\psi) + (d_{\mathbf{L}}\cot(\alpha_{\mathbf{HL}}) - d_{\mathbf{H}}\csc(\alpha_{\mathbf{HL}}))^2}} \quad (4.12)$$

Mit (4.12) kann ein λ - ψ -Plot erstellt werden. Abb. 4.6 zeigt eine solche Darstellung für den „fastverbotenen“ 6H-SiC 00.8 Reflex. Als sekundäre Reflexe werden in dieser Abbildung nur starke Reflexe berücksichtigt. Die Anzahl der umwegangeregten Reflexe pro Winkereinheit nimmt mit abnehmender Wellenlänge stark zu, da die EWALD-Kugel mit dem Radius $1/\lambda$ größer wird und die Wahrscheinlichkeit, andere reziproke Gitterpunkte zu durchschneiden, zunimmt. Deutlich zu erkennen ist ebenfalls die Spiegelsymmetrie, die alle 30° auftritt. Bei einem 00.l Reflex treten im hexagonalen Kristallsystem im Einklang mit der Punktgruppe $6mm$ zwölf äquivalente Umwegreflexe in einem 360° ψ -scan auf. Abb. 4.7 zeigt einen Ausschnitt von Abb. 4.6. Positionen äquivalenter Umwegreflexe sind azimuthal symmetrisch um den Punkt $\psi = 0^\circ$ angeordnet. Zusätzlich ist noch eine Linie konstanter Wellenlänge eingezeichnet (rot). Die Schnittpunkte dieser Linie mit den nach (4.12) berechneten Linien (blau) geben die azimuthalen Positionen der Mehrstrahlfälle bei dieser Wellenlänge wieder.

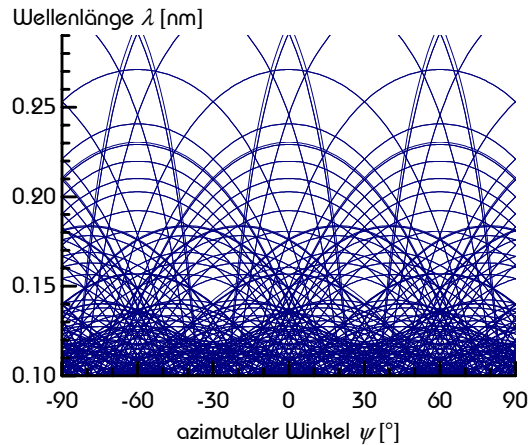


Abb. 4.6: λ - ψ -Darstellung des 6H-SiC 00.8 Reflexes im Wellenlängenbereich von 0.10 nm bis 0.29 nm. Deutlich zu sehen ist die Zunahme der azimuthalen Dichte der umwegangeregten Reflexe zu kleineren Wellenlängen hin.

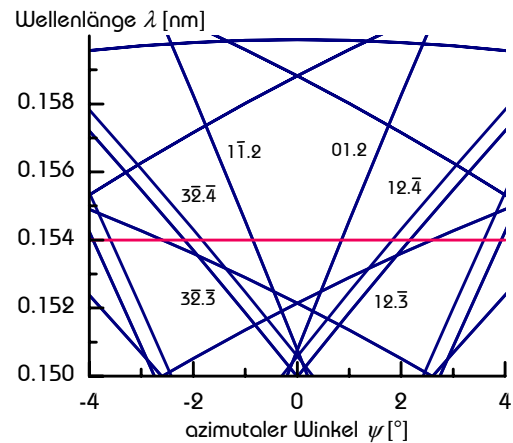


Abb. 4.7: Ausschnitt von Abb. 4.6. Bei den um die Symmetrie liegenden Reflexen sind die MILLER-Indizes angegeben. Die rote Linie kennzeichnet eine gegebene Wellenlänge ($\lambda = 0.154$ nm). Die Schnittpunkte mit den blauen Linien kennzeichnen die azimuthale Lage der Mehrstrahlfälle.

Durchkreuzt die Umweglinie (blau) die Wellenlängenlinie (rot) mit positiver Steigung liegt ein *out* \rightarrow *in* Fall vor, da unterhalb der roten Linie $|\mathbf{k}_0 + \mathbf{L}| > |\mathbf{k}_H| = |\mathbf{k}_0|$ gilt. Bei negativer Steigung liegt demnach ein *in* \rightarrow *out* Fall vor.

Für die Bestimmung der Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe aus den Integralintensitäten von *Rocking*-Kurven (s. Kap. 3) stellt die Umweganregung einen Störeffekt dar. Hier ist es vorteilhaft, die Messungen an solchen azimutalen Positionen durchzuführen, die möglichst weit entfernt von den Umweganregungen sind. Gegebenenfalls muss der Einfluss der Umweganregung korrigiert werden.

4.2.3 Intensitätsverlauf nach SHEN

Zu Unterscheidung der Modelle $+1_{nH}$ und -1_{nH} der Siliziumkarbid Polytypen $4H$ und $6H$ wird der theoretische Intensitätsverlauf in der Nähe eines Dreistrahlfalls benötigt, um ihn mit den gemessenen Dreistrahlprofilen vergleichen zu können. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Simulation dieses Intensitätsverlaufes die Theorie nach Q. SHEN verwendet. Bei dieser Theorie handelt es sich um eine kinematische Approximation, die besonders für den Fall schwacher primärer und starker Umwegreflexe geeignet ist. Hier soll nur auf die wesentlichen Dinge eingegangen werden. Eine ausführliche Herleitung und Diskussion findet sich in der Veröffentlichung von Q. SHEN (SHEN (1986)). Der Vorteil einer kinematischen Approximation gegenüber der exakten dynamischen Lösung liegt in der einfacheren Handhabung. Es müssen keine Eigenwertgleichungen gelöst werden und man erhält einen analytischen leicht zu programmierbaren Ausdruck, der das Simulieren und, falls nötig, das Anpassen von Dreistrahlprofilen sehr vereinfacht.

In dieser Theorie wird der Dreistrahlfall als Störung des Zweistrahlalles durch die Umweganregung behandelt. Als Ansatz zur Lösung der Wellengleichung

$$(\nabla^2 + k_0^2) \mathbf{D} = -\nabla \times \nabla \times (\delta\epsilon \mathbf{D}) \quad (4.13)$$

dient in der SHENschen Approximation die aus der Quantenstreutheorie vertraute erste BORNsche Näherung (z.B. JACKSON (1983)):

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{x}' \frac{e^{-ik_0|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \times \nabla' \times \nabla' (\delta\epsilon(\mathbf{x}') \mathbf{D}(\mathbf{x}')) \quad (4.14)$$

wobei in (4.13) und (4.14) \mathbf{D} die dielektrische Verschiebung, \mathbf{x} den Ortsvektor und k_0 den Betrag des Wellenvektors \mathbf{k}_0 darstellt. $\delta\epsilon(\mathbf{x})$ ist außerhalb des Kristalls 0 und innerhalb eine Funktion proportional der elektrischen Ladungsdichte. Die Lösung nullter Ordnung ist die einfallende Welle, diejenige erster Ordnung beschreibt den Zweistrahlfall in kinematischer Näherung und die Lösung zweiter Ordnung den Dreistrahlfall. Höhere Ordnungen müssen demnach nicht berücksichtigt werden. Die Lösungen sind im einzelnen:

$$\mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}_0 e^{-ik_0 r} \quad (4.15)$$

$$\mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{x}) = N r_e F_H \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{D}_0) \frac{e^{-ik_0 r}}{r} \quad (4.16)$$

$$\mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{x}) = -N r_e \Gamma \frac{e^{-ik_0 r}}{r} \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}} \times \left[\sum_{\mathbf{L}} F_{H-L} F_L \frac{\mathbf{k}_L \times (\mathbf{k}_L \times \mathbf{D}_0)}{k_0^2 - k_L^2} \right] \quad (4.17)$$

wobei N die Anzahl der Elementarzellen im Kristall ist, $\Gamma = r_e \lambda^2 / (\pi V_C)$, V_C das Volumen der Elementarzelle, r_e der klassische Elektronenradius, $r = |\mathbf{x}|$ und $k_L = |\mathbf{k}_L|$. $\hat{\mathbf{n}}$ ist der Einheitsvektor in Richtung des abgelenkten Strahls (Abb. 4.8). Wird (4.16) mit (4.17) verbunden, erhält man das gesamte abgelenkte Wellenfeld in Richtung $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = N r_e \frac{e^{-ik_0 r}}{r} \hat{\mathbf{n}} \times \left[\hat{\mathbf{n}} \times \left[F_H \mathbf{D}_0 - \Gamma \sum_{\mathbf{L}} \gamma_{HL} e^{i\varphi_3} F_{H-L} F_L \frac{\mathbf{k}_L \times (\mathbf{k}_L \times \mathbf{D}_0)}{k_0^2 - k_L^2} \right] \right] \quad (4.18)$$

mit $\gamma_{HL} = \Gamma \left| \frac{F_{H-L} F_L}{F_H} \right|$. Die Intensität der gebeugten Welle ergibt sich aus:

$$I = \frac{\mathbf{D} \mathbf{D}^*}{|\mathbf{D}_0|^2} \quad (4.19)$$

Normiert man die Dreistrahlintensität auf die Intensität des ungestörten Zweistrahlalles in σ -Polarisation und erstreckt sich die Summe in (4.18) nur über einen reziproken Gittervektor \mathbf{L} , so erhält man mit (4.19) folgende Intensität des Dreistrahlalles für σ -Polarisation:

$$I_\sigma = 1 + \gamma_{HL}^2 \frac{(k_L^2 - L_\sigma^2)^2 + (k_{L\pi} L_\sigma)^2}{(k_0^2 - k_L^2)^2} + 2\gamma_{HL} \cos(\varphi_3) \frac{k_L^2 - L_\sigma^2}{k_0^2 - k_L^2} \quad (4.20)$$

und für π -Polarisation:

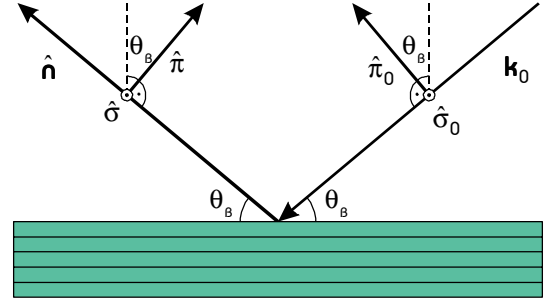
$$\begin{aligned} I_\pi = & \cos^2(2\theta_H) + \gamma_{HL}^2 \frac{(k_L^2 \cos(2\theta_H) - k_{L\pi} k_{Ln\pi})^2 + (L_\sigma k_{Ln\pi})^2}{(k_0^2 - k_L^2)^2} \\ & + 2\gamma_{HL} \cos(\varphi_3) \frac{k_L^2 \cos(2\theta_H) - k_{L\pi} k_{Ln\pi}}{k_0^2 - k_L^2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

mit $L_\sigma = \mathbf{L} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, $k_{Ln} = \mathbf{k}_L \cdot \hat{\mathbf{n}}$, $k_{L\pi} = \mathbf{k}_L \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}$, $k_{Ln\pi} = k_{Ln} \sin(2\theta_H) + k_{L\pi} \cos(2\theta_H)$. $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ sind in Abb. 4.8 definiert. Für \mathbf{k}_L gilt:

$$\mathbf{k}_L = \mathbf{k}_0 + \mathbf{L} \quad (4.22)$$

Abb. 4.8: Illustration eines Zweistrahlfalls.

$\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_0$ sind Einheitsvektoren senkrecht zur Beugungsebene, die durch \mathbf{k}_0 und $\hat{\mathbf{n}}$ gebildet wird. $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\sigma}$ und $\hat{\pi}_0 = \mathbf{k}_0 \times \hat{\sigma}_0 / |\mathbf{k}_0|$.



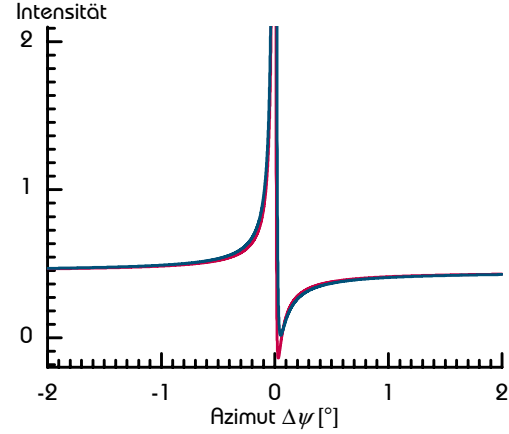
\mathbf{k}_L ist nach (4.22) eine Rechengröße und kein Wellenvektor und hat nur genau dann den Betrag $1/\lambda$, wenn der reziproke Gittervektor des sekundären Reflexes \mathbf{L} auf der EWALD-Kugel liegt. Da (4.20) und (4.21) für $\mathbf{k}_L = \mathbf{k}_0$ Singularitäten aufweisen, ist die kinematische Näherung nach SHEN nur in den Ausläufern des Dreistrahl-*Peaks* gültig, nicht aber in dessen Zentrum. Im Allgemeinen ist \mathbf{k}_0 , und damit alle aus \mathbf{k}_0 gebildeten Vektoren und Skalare in (4.20) und (4.21), abhängig vom azimutalen Winkel ψ . Die Gleichungen (4.20) und (4.21) bestehen beide aus drei Summanden, die in der folgenden Diskussion I, II und III genannt werden (REISCHAUER (1999)):

$$I_{\sigma/\pi}(\psi) = \underbrace{a}_{\text{I}} + \underbrace{b^2}_{\text{II}}(\psi) + \underbrace{c}_{\text{III}}(\varphi_3, \psi) \quad (4.23)$$

- I: Dieser erste Term ist konstant und beschreibt die Zweistrahlintensität des primären Reflexes \mathbf{H} . Die Dreistrahlprofile nach (4.20) und (4.21) gehen in großer azimuthaler Entfernung vom Dreistrahlfall asymptotisch in diese über.
- II: Der zweite Term beschreibt den phasenunabhängigen Teil des Intensitätsprofils. Da dieser Term quadratisch ist, überwiegt er im Zentrum des Dreistrahl-*Peaks*. Er wird verursacht durch den Energiefluss in \mathbf{k}_H Richtung, der durch die Beugung über die zwei Reflexe \mathbf{L} und $\mathbf{H-L}$ verursacht wird. (CHANG & TANG (1988), WECKERT & HÜMMER (1990)).
- III: Dieser dritte Term beschreibt die Interferenz zwischen der Welle des Zweistrahlfalls und der Umwegwelle, also zwischen den in I und II beschriebenen Wellen. Dieser Anteil ist abhängig von der Dreistrahlphase und ist für die Asymmetrie des Dreistrahlprofils verantwortlich. Aus dem Verlauf von $\cos(\varphi_3)$ ist zu erkennen, dass die Asymmetrie am stärksten bei einer Dreistrahlphase von 0° oder $\pm 180^\circ$ ausgeprägt ist. Bei einer Dreistrahlphase von $\pm 90^\circ$ verschwindet dieser Term und das Profil wird symmetrisch.

Die kinematische Approximation nach SHEN berücksichtigt nicht explizit den zusätzlichen Phasenterm $\Delta(\psi)$ (4.6). In der SHENschen Theorie wird der Verlauf der Resonanzphase durch eine Stufenfunktion genähert, die bei $\Delta\psi = 0$ von 0 auf 180° springt (*in* \rightarrow *out*) oder umgekehrt (*out* \rightarrow *in*). Da in unserem Fall \mathbf{H} – mit $|F_H| = |F_{\text{qf}}| \approx 10^{-1}$ – ein sehr schwacher „fastverbotener“ Reflex ist, \mathbf{L} und $\mathbf{H-L}$ starke Reflexe – mit $|F_L|, |F_{H-L}| > 10^1$ – dominiert der phasenunabhängige durch Umweganregung verursachte Anteil im Zentrum des Dreistrahlprofils.

Abb. 4.9: Vergleich eines Dreistrahlprofils der kinematischen Näherung nach SHEN (—) mit der dynamischen Berechnung nach WECKERT (—) am Beispiel des primären $6H$ -SiC Reflexes $00.\bar{8}$ und sekundären Reflexes 01.2 im $out \rightarrow in$ Fall (π -Polarisation). Zur Berechnung der Strukturfaktoren diente das Modell KÄCKELL (Tab. 3.1).



Die Phaseninformationen werden aus den Ausläufern gewonnen, da dort die primäre und die Umwegwelle eine vergleichbare Amplitude besitzen. Für einen Abstand vom Zentrum des Dreistrahlprofils, der groß ist im Vergleich zur Halbwertsbreite des Umwegreflexes wird $\Delta(\psi) \approx 0$ bzw. $\Delta(\psi) \approx 180^\circ$ (Abb. 4.3), da dort gilt:

$$\cos(\varphi_3 + \Delta(\psi)) = +\cos(\varphi_3) \quad \text{bzw.} \quad \cos(\varphi_3 + \Delta(\psi)) = -\cos(\varphi_3) \quad (4.24)$$

Dies wird im Interferenzterm von (4.20) und (4.21) durch den Vorzeichenwechsel im Nenner ($\mathbf{k}_0^2 - \mathbf{k}_L^2$) beim Durchgang des reziproken Gittervektors \mathbf{L} durch die EWALD-Kugel berücksichtigt. Damit hat auch die Polarität der hexagonalen Siliziumkarbidstruktur keinen Einfluss auf das Dreistrahlprofil, d.h. die Profile von \mathbf{H} und $\bar{\mathbf{H}}$ sind identisch, da sich die Dreistrahlphasen von \mathbf{H} und $\bar{\mathbf{H}}$ nur im Vorzeichen unterscheiden und damit deren Kosinus identisch ist. Den Vergleich eines Dreistrahlprofils eines „fastverbotenen“ primären Reflexes und zwei starken Umwegreflexen zwischen der Approximation nach SHEN und der dynamischen Theorie (WECKERT & HÜMMER (1990))^a zeigt Abb. 4.9. In den Ausläufern des *Peaks* zeigt sich eine fast perfekte Übereinstimmung zwischen den zwei Berechnungsarten. Abb. 4.10 zeigt Dreistrahlprofile nach der oben beschriebenen Theorie am Beispiel eines „fastverbotenen“ primären Reflexes \mathbf{H} und zwei starken Reflexen \mathbf{L} und $\mathbf{H-L}$ in π -Polarisation für einen $out \rightarrow in$ Fall. Weit weg vom Zentrum nähert sich das Profil asymptotisch $\cos^2(2\theta_{\mathbf{H}})$. Dreistrahlprofile mit dem Phasentriplett φ_3 und $180^\circ - \varphi_3$ zeigen spiegelbildliches Verhalten. Bei $\varphi_3 = 90^\circ$ verschwindet die Asymmetrie. Liegt die Dreistrahlphase φ_3 nahe bei 0° oder 180° zeigt das Dreistrahlprofil am auffälligsten die Asymmetrie in den Ausläufern. Zur Unterscheidung der Relaxationsmodelle $+1_{nH}$ und -1_{nH} ist es demnach am günstigsten, solche Reflexkombinationen zu untersuchen, deren Triplettphase nahe bei 0° oder 180° liegt. Ein solches Beispiel zeigt Abb. 4.11. Aus den nach dem Modell KÄCKELL berechneten Strukturfaktoren für die beteiligten Reflexe ergibt sich eine Dreistrahlphase φ_3 von -40° .

^a Das Dreistrahlprofil nach der dynamischen Theorie wurde mit dem Programm DREIST von E. Weckert berechnet.

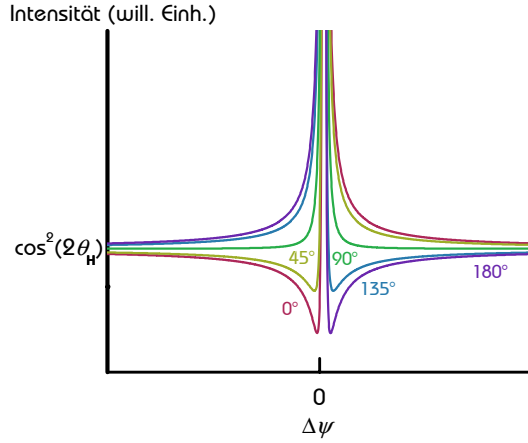


Abb. 4.10: Dreistrahlprofile für einen „fastverbotenen“ Reflex **H** und starke Reflexe **L** und **H–L** in Abhängigkeit der Dreistrahlphase φ_3 nach der Theorie von SHEN für einen *out* → *in* Fall in π -Polarisation. $\Delta\psi = 0$ kennzeichnet die exakte Dreistrahlposition.

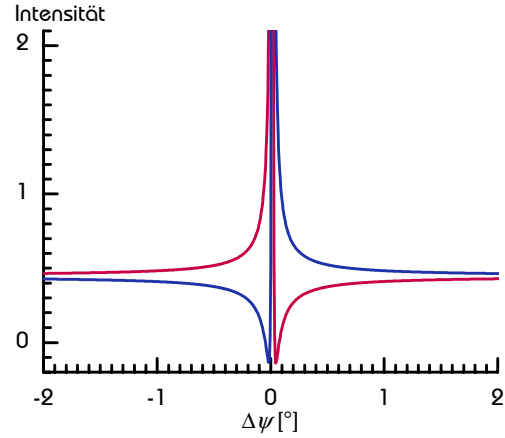


Abb. 4.11: Dreistrahlprofile des primären 6H-SiC Reflexes $00.\bar{8}$ und sekundären Reflexes 01.2 im *out* → *in* Fall (π -Polarisation). Rot: Modell KÄCKELL. Bei der blauen Kurve wurden die Vorzeichen der Relaxationsparameter getauscht.

Tauscht man die Vorzeichen der Relaxationsparameter um (Modell $+1_{nH} \rightarrow -1_{nH}$) so ändert sich die φ_3 zu 140° . Mit der Untersuchung von Dreistrahlfällen ist es demnach möglich, zwischen den Relaxationsmodellen $+1_{nH}$ und -1_{nH} zweifelsfrei zu unterscheiden.

Anmerkung:

Ist der primäre „fastverbotene“ Reflex **H** ein $00.l$ Reflex, so gibt es im Dreistrahlfall neben dem Reflex **L** aufgrund der Symmetrien im hexagonalen Kristallsystem immer noch einen weiteren Reflex **L'**, der ebenfalls auf der EWALD-Kugel liegt. Demnach ist auch der Reflex **H–L'** in Reflexionsstellung. Dies ist deutlich in Abb. 4.4 zu sehen. Bei primären $00.l$ Reflexen sind drei KOSSEL-Kreise an den Schnittpunkten beteiligt. Für die MILLER-Indizes des Reflexes **L'** gilt: $h_{L'} = -(h_H - h_L)$, $k_{L'} = -(k_H - k_L)$, $l_{L'} = +(l_H - l_L)$. Die resultierenden Vierstrahlfälle **H**, **L'**, **L'–L**, **H–L** und **H**, **L**, **L–L'**, **H–L'** sind vernachlässigbar, da **L'–L** und **L–L'** immer schwache „fastverbotene“ Reflexe sind. Die zwei Dreistrahlfälle **H**, **L**, **H–L** und **H**, **L'**, **H–L'** sind äquivalent bezüglich der Kristallsymmetrie, d.h. ihr Dreistrahlprofil ist identisch. Es gilt:

$$\left| \frac{F_{H-L} F_L}{F_H} \right| = \left| \frac{F_{H-L'} F_{L'}}{F_H} \right| \quad (4.25)$$

und:

$$\varphi_L + \varphi_{H-L} - \varphi_H = \varphi_{L'} + \varphi_{H-L'} - \varphi_H \quad (4.26)$$

5 Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel werden die Apparaturen vorgestellt, an denen die Resultate dieser Arbeit gewonnen wurden. Die Messung der „fastverbotenen“ Reflexe, sowie der „RENNINGER-Scans“ erfolgte zum einen an einem Drehanodensystem im Institut für Optik und Quantenelektronik der Friedrich-Schiller-Universität Jena, zum anderen an der Rossendorfer *Beamline* (ROBL) an der *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) in Grenoble. Hochpräzise Bestimmungen von Gitterparametern einzelner Siliziumkarbid-Polytypen sind am „Jenaer Automatischen Röntgendiffraktometer“ (JARD) durchgeführt worden.

5.1 Drehanode mit 4-Kreisgoniometer D5000

Abb. 5.1 zeigt schematisch den Aufbau des Drehanodensystems mit hochauflösendem Diffraktometer D5000 von SIEMENS AXS. Der Röntgenstrahl wird in einer Drehanode erzeugt, deren maximale Leistung 18 kW beträgt. Als Anodenmaterial diente bei allen an diesem Gerät durchgeführten Messungen Kupfer. Zur Monochromatisierung und Kollimierung durchläuft der Röntgenstrahl einen Vierfachmonochromator bestehend aus zwei Germanium *Channel-Cuts* (BARTELS-Monochromator (BARTELS (1983))). Die Wellenlängenselektion wird aus einer Kombination der nichtdispersiven (+n, -n) und der dispersiven (+n,+n) Geometrie erreicht. Die Germaniumkristalle sind 110 orientiert und der gewählte Germaniumreflex war 220. Monochromatisiert wurde der Röntgenstrahl auf die Kupfer $K\alpha_1$ -Linie ($\lambda = 0.1540562$ nm). Die Divergenz des Strahles in der Dispersionsebene betrug nach Austritt aus dem Monochromator ca. 0.003° , senkrecht dazu geometriebedingt ca. 0.4° . Einige Charakteristika des Monochromators sind in Tab. 5.1 aufgeführt.

Das Diffraktometer D5000 ist mit einer $\frac{1}{4}$ -Kreis Eulerwiege (HUBER) (χ -Kreis) ausgestattet. Dies erlaubt eine Bewegung der Probe innerhalb gewisser Grenzen auf den Eulerkreisen ω , ϕ und χ (Abb. 5.1). Zusätzlich ist eine Probentranslation in x-, y- und z-Richtung möglich. Um geringfügige Fehlschnitte (bis ca. 8°) der Probenkristalle auszugleichen wurde ein elektrisch betriebener Wiegeschlitten auf den Probentisch montiert.

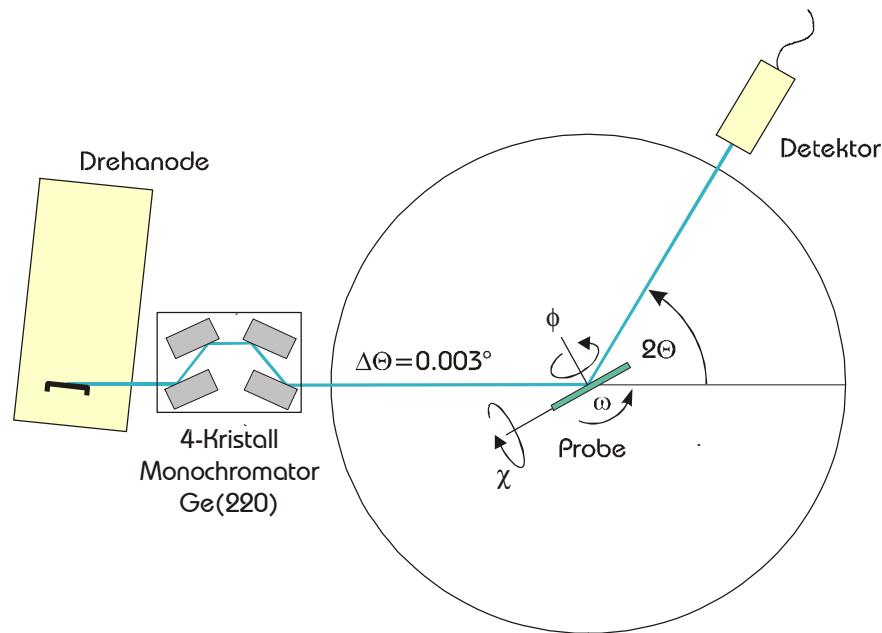


Abb. 5.1: Schematischer Aufbau des Drehanodensystems mit BARTELS-Monochromator zur Primärstrahl-Monochromatisierung und –kollimierung. ω bzw. 2θ : Drehung der Probe bzw. des Detektors in der Dispersionsebene; ϕ : Drehung der Probe um die Proben-tischnormale; χ : Verkippung der Probe senkrecht zur Dispersi-onsebene; $\Delta\theta$: Strahldivergenz in der Dispersionsebene nach Durchlaufen des Vierfachmonochromators.

Dies lässt Drehungen um Netzebenennormalen zu, die mit der Oberflächennormalen des Pro-bentisches übereinstimmen oder nur leicht davon abweichen. Die minimale Schrittweite des ω -Kreises beträgt 0.0002° . Die genaue Positionen kann durch einen *Encoder* (HEIDENHEIM) auf 0.00005° genau bestimmt werden.

Tab. 5.1: Charakteristiken des Vierfach-Monochromators (zwei Germani-um *Channel Cuts*) nach MÖLLER (1994). $\lambda_{K\alpha_1}$ ist die Wellenlänge der charakteristischen $K\alpha_1$ Linie des Anodenmaterials, hkl be-zeichnen die MILLERSchen Indizes des verwendeten Germanium-reflexes, θ_B den BRAGG-Winkel dieses Reflexes. In den letzten zwei Spalten ist das Verhältnis von σ -polarisierter (normal pola-risiert) bzw. π -polarisierter (parallel polarisiert) Intensität nach der Vierfachreflexion zur einfallenden Intensität gegeben.

Anode	hkl	$\lambda_{K\alpha_1}$ [nm]	θ_B [°]	$\frac{I_\sigma}{I}$ [%]	$\frac{I_\pi}{I}$ [%]
Kupfer	220	0.1540562	22.65	70.8	29.2

5.2 ROBL-Beamline an der European Synchrotron Radiation Facility in Grenoble

Da am Drehanodensystem wegen der großen Divergenz senkrecht zur Dispersionsebene phasensensitive Messungen von „RENNINGER-Scans“ nicht möglich waren, wurden, auch wegen der vielfach höheren Intensität, Messungen am Synchrotron in Grenoble durchgeführt. Ein weiterer Vorteil der Synchrotronstrahlung sind die eindeutigen Polaritätsverhältnisse. Die ROBL Beamline (MATZ *et al.* (1999)) an der ESRF befindet sich am Ablenkmagneten BM 20. Abb. 5.2 zeigt die Röntgenoptik dieser Beamline. Der am Ablenkmagneten erzeugte Röntgenstrahl wird am ersten Spiegel (M1) reflektiert, passiert anschließend den Silizium Doppelkristallmonochromator und wird nochmals über einen Spiegel (M2) gelenkt. Die Energie der Röntgenstrahlen ist von 5 keV ($\lambda = 0.25$ nm) bis 35 keV ($\lambda = 0.035$ nm) einstellbar. Die zwei Spiegel, auf die der Strahl mit einem Einfallswinkel von 2.5 mrad trifft, unterdrücken die höheren Harmonischen bis zu 10^{-4} . Diese Spiegel sind mit parallelen Streifen aus Silizium bzw. Platin beschichtet. Si wird in dem Energiebereich von 5 keV – 12 keV eingesetzt, darüber Pt. Der erste Spiegel ist gekrümmt, um den Röntgenstrahl auf den ersten Monochromatorkristall zu kollimieren. Der Doppelkristallmonochromator ist so konstruiert, dass der Röntgenstrahl unabhängig von seiner Energie den Monochromator immer auf gleicher Höhe verlässt (*fixed-exit*). Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen diente der Silizium 111 Reflex zur Monochromatisierung. Am Messplatz der Materialforschung steht ein Sechs-Kreis-Goniometer (HUBER) zur Verfügung (Abb. 5.3). Zusätzlich zu den am D5000 vorhandenen Probenkreisen ω , ϕ und χ , ist noch ein weiterer Kreis θ vorhanden. Der Detektor lässt sich durch seine zwei Kreise 2θ und 2ω innerhalb seiner geometrischen Grenzen an jede beliebige Position des Raumes bewegen. Das Sechs-Kreis-Goniometer erlaubt bei horizontaler Dispersionsebene eine Drehung der Probe um jede beliebige Netzebenennormale.

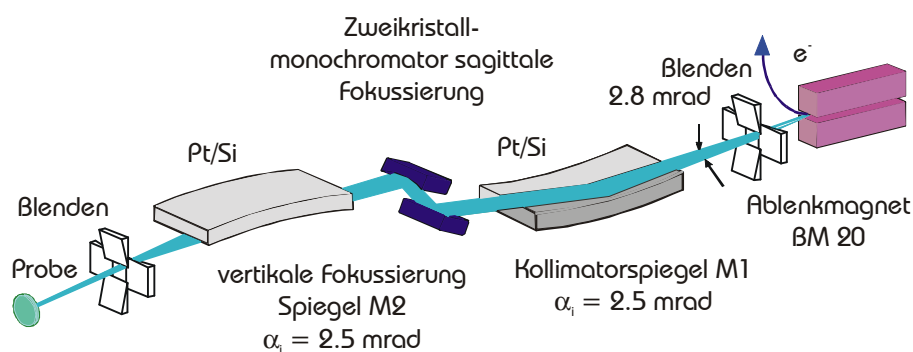


Abb. 5.2^a: Schema der Röntgenoptik der ROBL Beamline.

^a Graphik übernommen aus: "Project – Group ESRF-Beamline (ROBL-CGR)", Report January 1998–June 1999, Forschungszentrum Rossendorf, (1999).

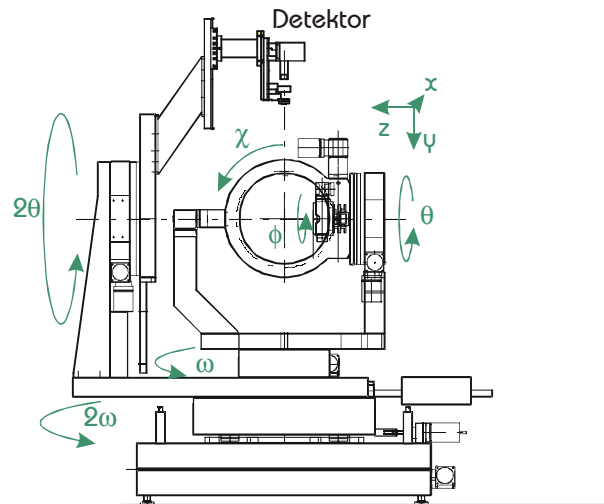


Abb. 5.3: Sechs-Kreis-Goniometer bei ROBL. Probenkreise: θ , ω , ϕ und χ , Detektorkreise 2θ und 2ω , Translationen: x , y , z (nach MATZ *et al.* (1999))

5.3 Bond Apparatur JARD

Die hochpräzisen Bestimmung der a - und c -Gitterkonstanten der Siliziumkarbid Polytypen erfolgte am „Jenaer automatischen Röntgendiffraktometer“ (GROSWIG (1984), WOLF (1994)) mittels der BOND-Methode (BOND (1960)).

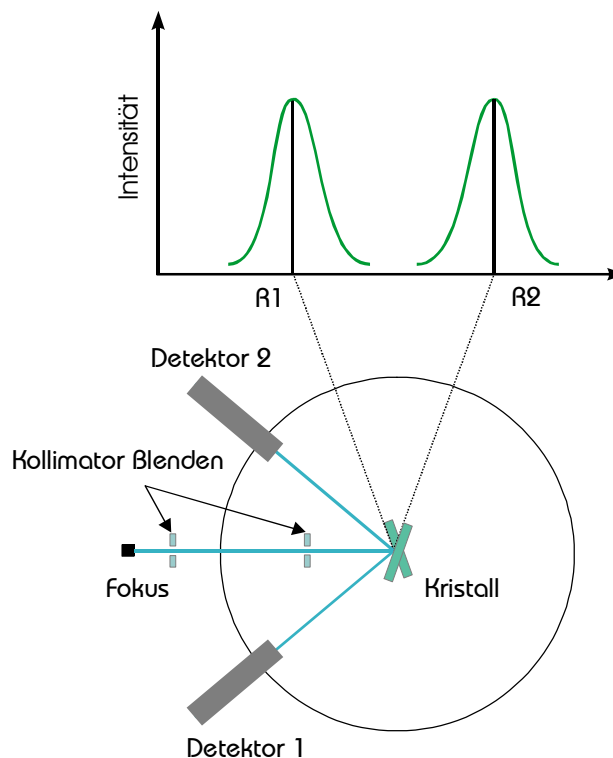


Abb. 5.4: Messprinzip der BOND-Methode (WOLF (1994)).

Dieses Verfahren dient zur präzisen Bestimmung von Netzebenenabständen von nahezu perfekten Einkristallen durch Messung des Winkels zwischen zwei Kristallpositionen, für die die BRAGG-Bedingung an der gleichen Netzebenenschar erfüllt ist (Abb. 5.4). Die Intensitätsverteilung wird in der Umgebung der beiden Maxima aufgenommen und daraus der BRAGG-Winkel θ_B bestimmt. Aus diesem wird wiederum mittels BRAGGscher Gleichung der Netzebenenabstand der gemessenen Netzebenenschar berechnet, aus welchen die Gitterparameter bestimmt werden können. Die Genauigkeit der Bestimmung des Netzebenenabstandes ist vom gewählten Reflex abhängig. Aus der differenzierten BRAGG-Gleichung

$$\frac{\Delta d_{hkl}}{d_{hkl}} = \cot \theta_B \Delta \theta \quad (5.1)$$

wird deutlich, dass zu größeren BRAGG-Winkeln bei vorgegebener Gerätegenauigkeit die Genauigkeit hin steigt. Deshalb ist die Verwendung von hochindizierten Reflexen vorteilhaft. Mit JARD können Genauigkeiten von $\frac{\Delta d_{hkl}}{d_{hkl}} \approx 10^{-7}$ erreicht werden.

6 Experimentelle Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die experimentellen Ergebnisse zur Strukturverfeinerung der Polytypen $4H$ - und $6H$ -SiC, sowie die im Rahmen dieser Arbeit gemessenen a und c Gitterparameter der Polytypen $15R$ und $21R$ vorgestellt. Bei den Ergebnissen zur Strukturverfeinerung wird der Auswerteweg von den gemessenen Integralintensitäten der *Rocking*-Kurven der „fastverbotenen“ Reflexe bis zu den eindeutig bestimmten Relaxationsparametern beschrieben. Eine ausführliche Diskussion dieser Ergebnisse findet sich im anschließenden Kapitel 7.

6.1 $4H$ -SiC

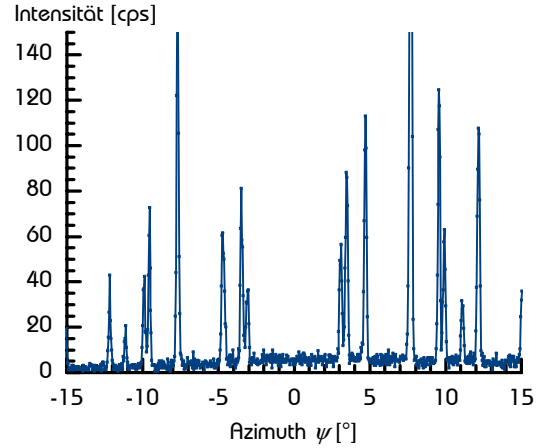
Für alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen an dem Polytypen $4H$ -SiC diente ein nach dem modifizierten LELY-Verfahren produzierter *Wafer* (CREE RESEARCH, Nr.: Z0042-4). Die polierte Oberfläche dieser Probe war siliziumdeterminiert, der Durchmesser des *Wafers* betrug ca. 35 mm, seine Dicke 0.3 mm.

6.1.1 Bestimmung der Strukturfaktoren

6.1.1.1 Drehanode

Die Strukturfaktoren zur Bestimmung der Relaxationsparameter nach dem in Kapitel 4 beschriebenen Lösungsverfahren wurden aus Integralintensitäten von *Rocking*-Kurven ermittelt. Um den Einfluss der Umweganregung möglichst gering zu halten, wurden ψ -scans durchgeführt und die *Rocking*-Kurven an den azimuthalen Positionen aufgenommen, die in möglichst großer Entfernung zum nächsten Mehrstrahlfall liegen. Alle Messungen wurden mit einer Kupferanode durchgeführt, deren Strahlung auf die $K\alpha_1$ -Linie monochromatisiert wurde ($\lambda = 0.1540562$ nm). Abb. 6.1 zeigt einen azimuthalen *Scan* um die Netzebenennormale des „fastverbotenen“ 00.10 Reflexes. Eine günstige azimuthale Position, die eine große Entfernung zu den nächstgelegenen umwegangeregten *Peaks* hat, wäre z.B. $\psi = 0^\circ$. Im Gegensatz zu den Messungen am Synchrotron konnten die in Kapitel 5 beschriebenen asymmetrischen Ausläufer der Umweganregungen bei Messungen an der Drehanode nicht beobachtet werden.

Abb. 6.1: Umweg-Scan des 4H-SiC 00.10 Reflexes. Deutlich zu erkennen ist die spiegelsymmetrische Anordnung der Umwegreflexe um $\psi = 0^\circ$. Die Intensitätsunterschiede von äquivalenten Umwegreflexen sind darauf zurückzuführen, dass die Netzebenennormale nicht exakt der Drehachse entsprach.



Ursache hierfür ist die große Divergenz senkrecht zur Dispersionsebene, die bei dem Drehanodesystem mit anschließenden BARTELS-Monochromator ca. 0.4° beträgt. Dies hat eine Mittelung in Richtung des ψ -scans zur Folge, was zu einem Verschwinden der Asymmetrien führen kann. Zum anderen sind die Asymmetrien signifikant nur am Fuß des *Peaks* bei weit unter einem Prozent der *Peak*-Höhe. Durch die weitaus schlechtere Photonenzustatistik der Messungen an der Drehanode, gehen die asymmetrischen Ausläufer im Rauschen unter.

Um aus den Integralintensitäten der gemessenen „fastverbotenen“ Reflexe den Strukturfaktor bestimmen zu können, ist eine Absoluteichung notwendig. Dies wurde durch die Messung der Integralintensität eines nahezu perfekten Siliziumkristalls bewerkstelligt. Zur Absoluteichung wurde der 333 Reflex benutzt. Dieser Reflex wurde unter den gleichen experimentellen Bedingungen wie die Reflexe der „fastverbotenen“ Siliziumkarbidreflexe vermessen.

Die geeichte Integralintensität des „fastverbotenen“ Reflexes $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ erhält man folgendermaßen:

$$\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}} = \frac{I_{\text{qf}}^{\text{mea}}}{I_{\text{Si}}^{\text{mea}}} \rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}, \quad (6.1)$$

wobei $I_{\text{qf}}^{\text{mea}}$ die aus der *Rocking*-Kurve eines „fastverbotenen“ Reflexes bestimmte, $I_{\text{Si}}^{\text{mea}}$ die aus der *Rocking*-Kurve des Siliziumkristalls und $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}$ die intrinsische Integralintensität des Siliziumeichreflexes ist. $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}$ wurde mit dem Programm DIXI (HÖLZER *et al.* (1998)) nach der dynamischen Theorie unter Berücksichtigung der in Tab. 6.1 gegebenen Polarisationsverhältnisse (70.8 % σ , 29.2 % π) berechnet.

Tab. 6.1: Gemessene Integralintensität $I_{\text{Si}}^{\text{mea}}$ des Silizium 333 Reflexes, sowie die nach der dynamischen Theorie berechnete intrinsische Integralintensität $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}$ des gleichen Reflexes unter Berücksichtigung der Polarisationsverhältnisse am Drehanodesystem.

Reflex	$I_{\text{Si}}^{\text{mea}}$ [cps·°]	$\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}$ [μrad]
333	95.92	7.369

Tab. 6.2: $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ und $|F_{\text{qf}}|$ der an dem Drehanodensystem gemessenen Reflexe 00.2, 00.6 und 00.10 von 4H-SiC.

Reflex	$\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ [nrad]	$ F_{\text{qf}} $
00.2	4.744	0.0996
00.6	4.310	0.1713
00.10	3.335	0.1759

Die gemessene $I_{\text{Si}}^{\text{mea}}$ sowie die intrinsische Integralintensität $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}}$ des Silizium 333 Reflexes sind in Tab. 6.1 aufgeführt. Aus den so erhaltenen geeichten Integralintensitäten kann der Absolutbetrag des Strukturfaktors $|F_{\text{qf}}|$ nach der kinematischen Theorie^a (JAMES (1982)) berechnet werden. Man erhält für $|F_{\text{qf}}|^{\text{b}}$:

$$|F_{\text{qf}}| = \sqrt{\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}} \frac{2\mu_{\text{SiC}}}{r_{\text{e}}^2} \cdot \frac{\sin(2\theta_{\text{B}}) V_{4\text{H}}^2}{\lambda^3} \cdot \frac{1}{0.708 + 0.292 \cdot \cos^2(2\theta_{\text{B}})}}, \quad (6.2)$$

Die geeichten Integralintensitäten, sowie die daraus nach (6.2) bestimmten Absolutbeträge der Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe 00.2, 00.6, 00.10 finden sich in Tab. 6.2.

6.1.1.2 Synchrotron

Die Bestimmung der Strukturfaktoren der am Synchrotron gemessenen „fastverbotenen“ Reflexe funktioniert analog zu dem oben vorgestellten Verfahren. Der Hauptvorteil von Messungen am Synchrotron ist die um ein vielfach höhere Intensität. Die Intensität des am Synchrotron gemessenen Reflexes ist um mehr als drei Größenordnungen höher als die Intensität des an der Drehanode gemessenen Reflexes. Bei den Messungen am Synchrotron musste der Einfluss der Umweganregung korrigiert werden. Hier zeigt sich hier auch in größeren Entfernungen zu einem Mehrstrahl-Peak eine Abweichung von der reinen Zweistrahlintensität (Abb. 6.2). Dies ist auf die sehr kleine Divergenz senkrecht zur Dispersionsebene zurückzuführen ($\approx 0.003^\circ$). Die Korrektur dieses Einflusses erfolgte durch eine Anpassung simulierter ψ -scans nach der SHENSchen Theorie (vgl. Kap. 4.2.3) an die gemessenen ψ -scans. Ein direkter Vergleich der gemessenen ψ -scans mit der aus der Theorie nach SHEN bestimmten azimuthalen Abhängigkeit der Integralintensitäten ist möglich, da die Apparatefunktion (FWHM ca. 0.003°) wesentlich breiter ist als die intrinsische Halbwertsbreite der *Rocking*-Kurven der „fastverbotenen“ Reflexe (FWHM ca. 10^{-4}°) und die Proben eine relativ hohe Perfektion aufwiesen. Dies bedeutet, dass die Halbwertsbreite einer *Rocking*-Kurve eines „fastverbotenen“ Reflexes wird einzig durch die Apparatefunktion bestimmt. Demnach ist die Integralintensität der „fastverbotenen“ Reflexe proportional der Intensität im Maximum der *Rocking*-Kurve, die bei einem ψ -scan gemessen wird.

^a Einige Grundbegriffe der Röntgenbeugung werden in Anhang A erklärt.

^b Der Wert für μ_{SiC} findet sich in Anhang C, r_{e} und $V_{4\text{H}}$ im Verzeichnis der Konstanten.

Abb. 6.2: Simulierter (—) und gemessener (—) ψ -scan des 4H-SiC 00.2 Reflexes zur Korrektur des Einflusses der Umweganregung auf die Intensitäten der gemessenen *Rocking*-Kurven ($\lambda = 0.15540$ nm). (—) Intensität des Zweistrahlfalles nach SHEN ($\cos^2(2\theta_B)$).

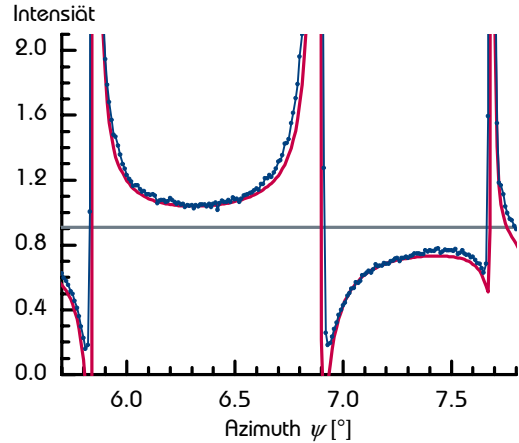


Abb. 6.2 zeigt einen solchen Vergleich am Beispiel des 00.2 Reflexes, wobei der Intensitätsmaßstab der experimentellen Daten derjenigen der Simulation angepasst wurden. Zur Anpassung der Daten wurde folgendermaßen vorgegangen (TISCHLER & BATTERMAN (1986)): Als Startwert diente ein vorgegebenes Modell, z.B. Strukturfaktoren, die aus dem Modell von KÄCKELL (Tab. 3.1) berechnet wurden. Diese wurden für jeden Reflex so variiert, dass eine beste Anpassung an die experimentelle Kurve erreicht wurde. Da die *Rocking*-Kurven in azimutalen Positionen aufgenommen wurden, die einen möglichst großen Abstand zu benachbarten Mehrstrahl-*Peaks* aufwiesen, sind die Anforderungen an das vorgegebene Modell nicht allzu hoch. Je größer die Entfernung zum Dreistrahlfall ist, desto näher liegt die Intensität am reinen Zweistrahlniveau und desto geringer sind die Unterschiede von Simulationen mit verschiedenen Parametern. Die aus den *Rocking*-Kurven bestimmten Integralintensitäten an einer bestimmten ψ -Position wurden auf das reine Zweistrahlniveau korrigiert. In Abb. 6.2 ist dieses durch die graue Linie gekennzeichnet ist. Der Korrekturfaktor der Integralintensitäten eines „fastverbotenen“ Reflexes an einer bestimmten azimutalen Position ist demnach der Quotient zwischen der simulierten Intensität an dieser Position (Abb. 6.2, rote Linie) und der normierten Intensität des Zweistrahlfalles in π -Polarisation $\cos^2(2\theta_B)$ (Abb. 6.2, graue Linie). Die Anpassung erwies sich als schwierig, da aufgrund der kleinen Halbwertsbreite der „fastverbotenen“ Reflexe, die Zweistrahlintensität nicht über einen größeren azimutalen Bereich konstant gehalten werden konnte, da die Netzebenennormale nicht exakt mit der Drehachse zusammenfiel^a. Die so korrigierten Integralintensitäten wurden auf einen Si-Reflex geeicht. Um den Einfluss des Ringstroms und der Optik der *Beamline* bei verschiedenen Wellenlängen auf die gemessene Intensität zu eliminieren, wurde alle gemessenen Intensitäten auf einen Monitorwert, der durch eine Streufolie im Strahl vor der Probe erhalten wurde, normiert. Als Eichreflex wurde der Si 111 Reflex benutzt, der bei einer Wellenlänge von 0.15383 nm in π -Polarisation vermessen wurde ($I_{\text{Si}}^{\text{mea}} = 3634227$ cps \cdot° , $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}} = 34.7808$ μrad).

^a Theoretisch wäre es auch möglich, Strukturfaktoren von „fastverbotenen“ Reflexen aus Dreistrahlprofilen zu erhalten. Allerdings ist das hier vorgestellte Verfahren, diese aus Integralintensitäten von *Rocking*-Kurven zu bestimmen wesentlich genauer, da hier Apparate bedingte Faktoren (Justage, Apparatefunktion) einen wesentlich kleineren Einfluss auf das Ergebnis haben und die Phasen aus den Dreistrahlprofilen nicht so genau bestimmt werden können.

Tab. 6.3: $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ und $|F_{\text{qf}}|$ der am Synchrotron bei der Wellenlänge λ gemessenen 4H-SiC Reflexe.

Reflex	Wellenlänge λ [nm]	$\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ [nrad]	$ F_{\text{qf}} $
00.2	0.15440	4.5760	0.1006
00.6		2.0297	0.1814
00.10	0.07123	4.2690	0.1926
00.14		0.8018	0.1473

Aus den geeichten Integralintensitäten wurde wiederum der Strukturfaktorbetrag bestimmt. Da alle Messungen am Synchrotron in π -Polarisation durchgeführt wurden, ergibt sich für den Betrag des Strukturfaktors analog zu (6.2):

$$|F_{\text{qf}}| = \sqrt{\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}} \frac{2\mu_{\text{SiC}}}{1 - e^{-\frac{2\mu_{\text{SiC}}d}{\sin\theta_{\text{B}}}}} \cdot \frac{\sin(2\theta_{\text{B}})V_{4\text{H}}^2}{r_{\text{e}}^2\lambda^3} \cdot \frac{1}{\cos^2(2\theta_{\text{B}})}} \quad (6.3)$$

Bei den Synchrotronmessungen mit kürzerer Wellenlänge ist zu beachten, dass die Dicke des verwendeten 4H-SiC Kristalls nicht ausreichte, um den Röntgenstrahl vollständig zu absorbieren. Dies wurde in (6.3) im Gegensatz zu (6.2) berücksichtigt^a. In Tab. 6.3 sind die geeichten Integralintensitäten, sowie die daraus nach (6.3) bestimmten Absolutbeträge der Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe 00.2, 00.6, 00.10 und 00.14 aufgeführt.

6.1.2 Bestimmung der Relaxationsparameter

Die Relaxationsparameter $\eta_{4\text{H}}$ und $\zeta_{4\text{H}}$ wurden aus den Absolutbeträgen der Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe mittels Lösung des Gleichungssystems, bestehend aus Gleichungen des Typs (3.8) bzw. (3.9)^b, bestimmt (vgl. Kap. 3.3.2.1). Die Lösungsellipsen der einzelnen „fastverbotenen“ 4H-SiC Reflexe sind in Abb. 6.3 dargestellt, wobei die Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* (1996) aus Tab. 3.6 verwendet wurden. Den vier Lösungen des Gleichungssystems entsprechen die vier Schnittpunkte von zwei Ellipsen. Wie schon in Kap. 3.3.2.1 ausgeführt, ergeben sich zwei gemeinsame Lösungen für alle Reflexe, die sich nur im Vorzeichen unterscheiden und mit $+1_{4\text{H}}$ und $-1_{4\text{H}}$ in Abb. 6.3 gekennzeichnet sind. Bei der quantitativen Bestimmung der Relaxationsparameter $\eta_{4\text{H}}$ und $\zeta_{4\text{H}}$ wurde das Gleichungssystem für jeweils zwei „fastverbotene“ Reflexe gelöst. Dabei ist es zweckmäßig, nur Reflexkombinationen zu verwenden, bei denen das Quadrat des absoluten Strukturfaktors des einen Reflexes nach (3.8) und das des anderen Reflexes nach (3.9) gebildet wird. Bei solchen Kombinationen, wie z.B. 00.2 und 00.6 ist der Schnittwinkel zwischen den Ellipsen nahe bei 90° (Abb. 6.3).

^a Siehe Anhang A

^b Eigentlich wurden die Gleichung (D.11) und (D.12) aus Anhang D verwendet, bei welchen die Dispersionskorrekturen berücksichtigt wurden.

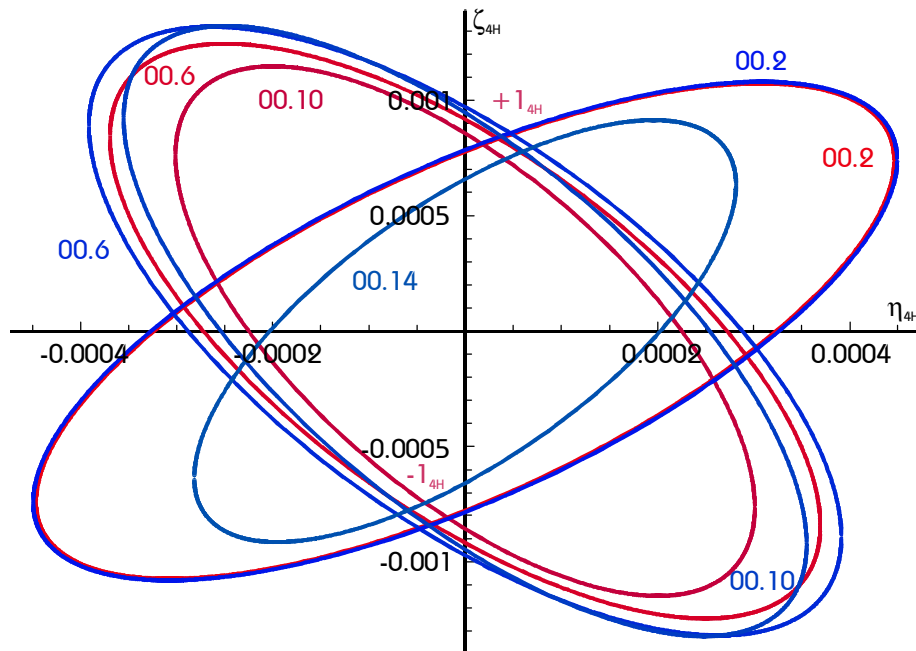


Abb. 6.3: Lösungsellipsen von (3.8) bzw. (3.9) $|F_{\text{qf}}|$ aus Tab. 6.2 (Drehanode, rote Linien) bzw. Tab. 6.3 (Synchrotron, blaue Linien), wobei die Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* (1996) verwendet wurden. $+1_{4H}$ und -1_{4H} die zwei Lösungen aller Gleichungen.

Dies bedeutet, dass z.B. kleine Fehler in der Bestimmung der Strukturfaktoren, welche die Größe der Ellipsen bestimmen, nur kleine Fehler in den Relaxationsparameter ergeben. Im Gegensatz dazu wäre die Fehlerfortpflanzung bei Kombination der Reflexe 00.6 und 00.10 oder 00.2 und 00.14 sehr ungünstig, da im ersten Falle der Schnittwinkel der Ellipsen sehr klein ist, d.h. ein kleiner Fehler in den Strukturfaktorbeträgen einen großen in den Relaxationsparameter nach sich ziehen würde oder die Ellipsen sich nicht schneiden, wie im zweiten Fall. Die so bestimmten Relaxationsparameter sind für das Modell $+1_{4H}$ in Tab. 6.4 aufgeführt. Die Lösungen für das Modell -1_{4H} werden durch Multiplikation der Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} mit -1 erhalten.

Tab. 6.4: Lösungen des Gleichungssystems η_{4H} und ζ_{4H} für das Modell $+1_{4H}$, wobei die Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* (1996) verwendet wurden. Modell -1_{4H} erhält man durch Multiplikation der Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} mit -1 .

	Reflexe	$\eta_{4H} \cdot 10^4$	$\zeta_{4H} \cdot 10^4$
Drehanode	00.2 + 00.6	0.351	8.34
	00.2 + 00.10	0.188	8.09
Synchrotron	00.2 + 00.6	0.467	8.59
	00.2 + 00.10	0.374	8.45
	00.14 + 00.6	0.703	7.96
	00.14 + 00.10	0.598	7.78

Ein Vergleich der aus Messungen an der Drehanode bestimmten Relaxationsparameter mit denen aus Synchrotronmessungen bestimmten ergibt zumindest eine qualitative Übereinstimmung. Hauptursache der Abweichungen dürfte die um Größenordnungen geringere Intensität der Drehanodenmessungen im Vergleich zu den Messungen am Synchrotron sein. Eine weitere Fehlerursache könnte darin liegen, dass es, bedingt durch die große Divergenz senkrecht zu Dispersionsebene, nicht möglich ist den Einfluss der Mehrstrahlfälle zu korrigieren.

Deshalb soll im folgenden nur noch auf die am Synchrotron gemessenen Werte eingegangen werden. Idealerweise müssten sich, wie in Abb. 3.3 am Modell KÄCKELL gezeigt, alle Ellipsen in zwei Punkten schneiden, deren η_{4H} und ζ_{4H} Koordinaten sich nur im Vorzeichen unterscheiden. Deutlich zu erkennen ist aber in Abb. 6.3, dass die Ellipsen zu höher indizierten Reflexen hin kleiner werden. Dieser Effekt tritt sowohl bei den Synchrotron- als auch bei den Drehanodenmessungen auf. Dies bedeutet, dass in Richtung zu höheren Reflexen entweder der gemessene Strukturfaktorbetrag zu klein oder die in Gl. (3.8) und (3.9) eingesetzten modifizierten Atomformfaktoren $f_T^X(hk.l)$ zu groß sind.

Naheliegender ist die zweite Annahme, als zu überprüfender Parameter kämen die Temperaturfaktoren in Betracht. Wählt man höhere Temperaturfaktoren, werden die Ellipsen höherindizierter Reflexe aufgrund der quadratischen Abhängigkeit vom MILLER-Index l stärker vergrößert, als die Ellipsen der niederindizierten Reflexe, so dass sich die Schnittpunkte gegeneinander annähern. Da die Relaxationsparameter und die Temperaturfaktoren aus den Absolutbeträgen der gemessenen Strukturfaktoren nicht analytisch bestimmt werden können, soll im folgenden nun der Einfluss der Temperaturfaktoren auf die Relaxationsparameter mittels eines *least-squares* Verfahrens untersucht werden. Dazu wurde folgender Gütefaktor R minimiert:

$$R = \sum_{00.2}^{00.14} \left(\left| F_{\text{qf}}^{\text{mea}}(hk.l) \right| - \left| F_{\text{qf}}^{\text{cal}}(hk.l) \right| \right)^2, \quad (6.4)$$

wobei $|F_{\text{qf}}^{\text{mea}}(hk.l)|$ die aus Synchrotronmessungen bestimmten Strukturfaktorbetrag der „fastverbotenen“ 4H-SiC Reflexe aus Tab. 6.3 sind und $|F_{\text{qf}}^{\text{cal}}(hk.l)|$ der berechnete Absolutbetrag der Strukturfaktoren des Verfeinerungsmodells nach (3.8) und (3.9). Für folgende Modelle wurde $R_{\min} = \min[R]$ berechnet:

- *Modell 1:* Das bestehende Modell aus Abb. 6.3 und Tab. 6.4, also Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* (1996). Variiert wurden nur die Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} .
- *Modell 2:* Wie Modell 1, also mittlere Temperaturfaktoren \bar{B}_{33}^{Si} und \bar{B}_{33}^{C} nach ZYWIETZ *et al.* (1996). Zusätzlich wurden hier, wie in Kap. 3.4 beschrieben, Abweichungen der Temperaturfaktoren $\Delta B_{33}^X(j)$ vom Mittelwert für die einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome in der Elementarzelle berücksichtigt.

- *Modell 3*: Alle Parameter wurden variiert, also sowohl die mittleren Temperaturfaktoren \bar{B}_{33}^{Si} und \bar{B}_{33}^{C} , als auch die Abweichungen vom Mittelwert $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$.
- *Modell 4*: Nur die Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} , sowie die mittleren Temperaturfaktoren \bar{B}_{33}^{Si} und \bar{B}_{33}^{C} wurden variiert, $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$ wurden konstant Null gesetzt.
- *Modell 5*: Als mittlere Temperaturfaktoren wurde die aus Modell 4 erhaltenen $\Delta \bar{B}_{33}^{\text{Si}}$ und $\Delta \bar{B}_{33}^{\text{C}}$ konstant gehalten, während die Abweichungen von den Mittelwerten $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$ variiert wurden.

Um eine Konvergenz der *least-squares* Verfeinerung in andere lokale Minima zu vermeiden wurden das Verfahren im Bereich um die Lösung $+1_{4H}$ (Abb. 6.3) durchgeführt. Die Ergebnisse dieser *least-squares* Verfeinerung finden sich in Tab. 6.5.

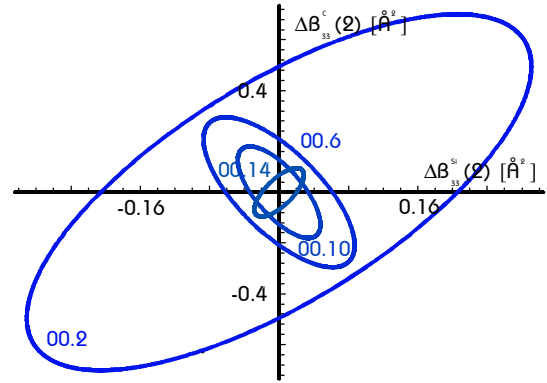
Aus der *least-squares* Verfeinerung lassen sich folgende Schlüsse ziehen:

- Mit den mittleren Temperaturfaktoren \bar{B}_{33}^{Si} und \bar{B}_{33}^{C} nach ZYWIETZ *et al.* (1996) ergibt sich kein Optimum bei der Verfeinerung. Auch unter Berücksichtigung von unterschiedlichen Temperaturfaktoren für die einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome in der Elementarzelle lässt sich der R_{\min} -Wert nicht deutlich reduzieren. Die besten Verfeinerungsergebnisse ergaben sich für Temperaturfaktoren, die etwa doppelt so hoch ($\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$) waren wie die von ZYWIETZ *et al.* (1996) berechneten (siehe Modelle 3, 4, 5).
- Ein merklicher Einfluss von unterschiedlichen Temperaturfaktoren für die einzelnen Silizium- bzw. für die einzelnen Kohlenstoffatome in der Elementarzelle lässt sich für den Polytyp $4H\text{-SiC}$ nicht nachweisen. Bei allen Verfeinerungsmodellen (Modelle 2, 3, 5), bei denen diese Parameter variiert wurden, ergaben sich für $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$ Werte nahe Null. Dieser Einfluss ist demnach, wie auch von ZYWIETZ *et al.* (1996) berechnet, zu vernachlässigen.

Tab. 6.5: Ergebnisse der *least-squares* Verfeinerung nach Modellen 1 bis 5. Die variierten Parameter sind im Normaldruck, die bei den jeweiligen Modellen konstant gehaltenen Parameter im Fettdruck dargestellt. η_{4H} und ζ_{4H} wurden in der Umgebung des Relaxationsmodells $+1_{4H}$ variiert. In der letzten Spalte ist das Minimum der quadratischen Abweichung R_{\min} nach (6.4) aufgeführt.

Modell	$\eta_{4H} \cdot 10^4$	$\zeta_{4H} \cdot 10^4$	$\bar{B}_{33}^{\text{Si}} [\text{\AA}^2]$	$\bar{B}_{33}^{\text{C}} [\text{\AA}^2]$	$\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) [\text{\AA}^2]$	$\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) [\text{\AA}^2]$	R_{\min}
1	0.58	8.04	0.211	0.257	0	0	$2 \cdot 10^{-4}$
2	0.48	8.30	0.211	0.257	-0.003	-0.007	$2 \cdot 10^{-5}$
3	0.51	8.70	0.410	0.560	0.000	-0.003	$1 \cdot 10^{-8}$
4	0.52	8.69	0.410	0.545	0	0	$1 \cdot 10^{-8}$
5	0.52	8.69	0.410	0.545	0.000	0.000	$1 \cdot 10^{-8}$

Abb. 6.4: Lösungsellipsen nach (3.30) für $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$ mit $\eta_{4H} \equiv 0$, $\zeta_{4H} \equiv 0$, $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$ und $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$.



Im Weiteren soll noch folgender Fall erörtert werden: Es träten überhaupt keine atomaren Relaxationen auf, d.h. $\eta_{4H} \equiv 0$ und $\zeta_{4H} \equiv 0$. Die Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe wären nur von Null verschieden, da die einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome in der Elementarzelle unterschiedliche thermische Auslenkungen besäßen (vgl. Kap. 3.4), d.h. $\Delta B_{33}^X(j) \neq 0$ ($X = \text{Si}, \text{C}; j = 1, 2$). Abb. 6.4 zeigt die Lösungsellipsen der Gleichung (3.30) für $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$, wobei die Strukturfaktoren der Synchrotronmessungen (Tab. 6.3) verwendet wurden. Mit diesen Strukturfaktoren und den aus dem *least-squares* Verfahren bestimmten Temperaturfaktoren (s.o.) lässt sich keine gemeinsame Lösung der vier vermessenen Reflexe finden. Ein gemeinsamer Schnittpunkt ergäbe sich nur durch eine physikalisch nicht zu vertretende Annahme von sehr hohen Temperaturfaktoren ($\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 4.66 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 6.13 \text{ \AA}^2$). Dies wird auch aus Abb. 3.6 ersichtlich, da dort die zu erwartenden Strukturfaktoren für ein Modell ohne atomare Relaxationen von denen des Modells Käckell deutlich abweichen.

Abb. 6.5 zeigt die Lösungsellipsen für die „fastverbotenen“ 4H-SiC Reflexe 00.2 bis 00.14, die mit dem Temperaturfaktor für die Siliziumatome $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$ bzw. dem für die Kohlenstoffatome $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$ und den aus den Synchrotronmessungen bestimmten Strukturfaktoren (Tab. 6.3) berechnet wurden.

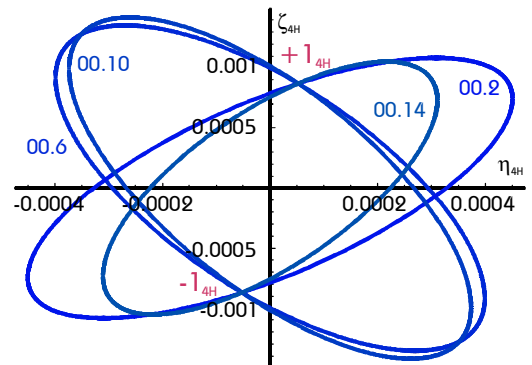


Abb. 6.5: Lösungsellipsen analog zu Abb. 6.3. für die Strukturfaktoren aus Tab. 6.3 (Synchrotron), wobei folgende Temperaturfaktoren verwendet wurden: $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$. $+1_{4H}$ und -1_{4H} kennzeichnen die zwei gemeinsamen Lösungen aller Gleichungen.

Tab. 6.6: Schnittpunkte der Ellipsen aus Abb. 6.5 für das Modell $+1_{4H}$, mit:
 $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$.

	Reflexe	$\eta_{4H} \cdot 10^4$	$\zeta_{4H} \cdot 10^4$
Synchrotron	00.2 + 00.6	0.521	8.690
	00.2 + 00.10	0.519	8.688
	00.14 + 00.6	0.522	8.690
	00.14 + 00.10	0.520	8.686

Deutlich ist die Verbesserung gegenüber Abb. 6.3 zu erkennen, die Ellipsen schneiden sich nahezu in zwei Punkten ($+1_{4H}$ und -1_{4H}). Die aus dem Gleichungssystem (3.8) und (3.9) ermittelten Lösungen für η_{4H} und ζ_{4H} , sind in Tab. 6.6 aufgeführt. Die Lösungen für das Modell -1_{4H} werden wiederum durch Vorzeichenänderung der Relaxationsparameter erhalten. Als Mittelwert erhält man für $\eta_{4H} = \pm 0.521 \cdot 10^{-4}$ und für $\zeta_{4H} = \pm 8.689 \cdot 10^{-4}$.

6.1.3 Eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter

Im folgenden sollen die Relaxationsparameter eindeutig bestimmt werden, d.h. eine Unterscheidung zwischen den Modellen $+1_{4H}$ und -1_{4H} erzielt werden. Wie in Kap. 4 beschrieben, werden dazu Phaseninformationen benötigt, die aus Messungen von Umweganregungen erhalten werden können. Dazu wurden ψ -scans von „fastverbotenen“ Reflexen durchgeführt und mit simulierten Kurven nach der Theorie von SHEN (vgl. Kap. 4.2.3) verglichen.

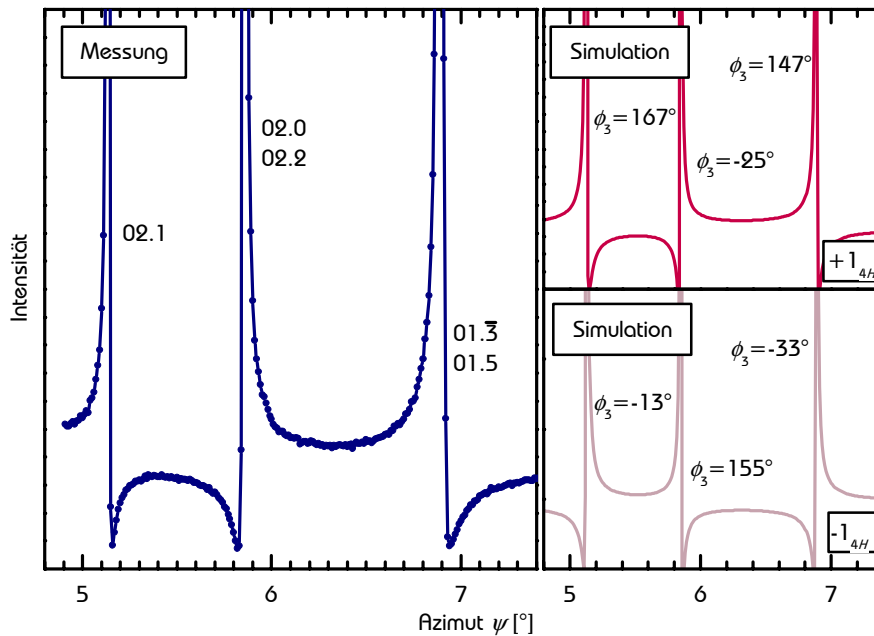


Abb. 6.6: Links: experimenteller ψ -scan des 4H-SiC 00.2 Reflexes ($\lambda = 0.15440 \text{ nm}$, π -Pol.). Die MILLER-Indizes von \mathbf{L} und \mathbf{L}' sind neben den Umweg-Peaks angegeben. Rechts oben: Simuliertes Profil nach SHEN (4.21) des gleichen Reflexes des Modells $+1_{4H}$ mit Angabe von ϕ_3 . Rechts unten: Simulation für das Modell -1_{4H} .

Tab. 6.7.: Phaseninvariante ϕ_3 von **L** und **L'** der 4H-SiC Relaxationsmodelle $+1_{4H}$ und -1_{4H} für $\eta_{4H} = \pm 0.521 \cdot 10^{-4}$ und $\zeta_{4H} = \pm 8.689 \cdot 10^{-4}$. *out* \rightarrow *in* bedeutet, dass während des ψ -scans **L** und **L'** die Ewald-Sphäre von außen nach innen durchqueren.

L / L'	$+1_{4H}$	-1_{4H}
02.1 / 02.1 (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	167°	-13°
02.0 / 02.2 (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	-25°	155°
01.3 / 01.5 (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	147°	-33°

Abb. 6.6 zeigt einen solchen Vergleich am Beispiel des „fastverbotenen“ 4H-SiC Reflexes 00.2. Die Messung wurde am Synchrotron bei einer Wellenlänge von 0.15440 nm in π -Polarisation durchgeführt. Besonders geeignet für eine Unterscheidung der zwei Modelle sind Reflexe, deren Phaseninvariante nahe bei 0° oder 180° liegt, da dort die Asymmetrie in den Ausläufern des Umwegreflexes am deutlichsten in Erscheinung tritt. Alle drei in Abb. 6.6 gezeigten Umwegreflexe zeigen ein ausgeprägtes asymmetrisches Verhalten. Neben der Messung sind die Simulationen nach der SHENSchen Theorie dargestellt. Die Simulationen wurden mit den oben ermittelten Relaxationsparametern ($\eta_{4H} = \pm 0.521 \cdot 10^{-4}$, $\zeta_{4H} = \pm 8.689 \cdot 10^{-4}$) durchgeführt. Die berechneten Phaseninvarianten sind neben den Umwegreflexen angegeben. In Tab. 6.7 sind die Phaseninvarianten, sowie der Drehsinn des Umwegreflexes durch die EWALD-Sphäre aufgeführt. Deutlich zu erkennen ist, dass die asymmetrischen Ausläufer aller drei Umwegreflexe bei Modell $+1_{4H}$ mit denen des gemessenen ψ -scans übereinstimmen. Modell -1_{4H} zeigt das entgegengesetzte Verhalten. Daraus ergibt sich, dass das Vorzeichen der Relaxationsparameter positiv ist, also $\eta_{4H} = +0.521 \cdot 10^{-4}$ und $\zeta_{4H} = +8.689 \cdot 10^{-4}$.

6.1.4 Fehlerabschätzung

Eine Fehlerabschätzung erweist sich als schwierig. Der statistische Fehler, der sich für den Betrag des Struktur factors aus der Photonenzählstatistik der Messungen der *Rocking*-Kurven am Synchrotron ergibt, ist kleiner als 1 ‰ und daher vernachlässigbar. Der Fehler, der durch die lineare Näherung der Struktur factors entsteht, lässt sich abschätzen, indem man aus den oben gewonnenen Relaxationsparametern die Struktur factors in linearer Näherung nach (3.8) und (3.9)) und exakt nach (3.4) berechnet. Die Differenzen liegen bei den verwendeten Reflexen zwischen etwa einem halben und einem Prozent.

Auch ein Vergleich der zurückgerechneten Struktur factors mit den aus den Messungen bestimmten ist ein Maß für den Fehler. Auch hier liegen die Abweichungen bei weit unter einem Prozent (Tab. 6.8). Weitere Fehlerquellen, die sich nicht einfach quantifizieren lassen, sind noch: die Korrektur des Einflusses der benachbarten Umweganregungen, die Realstruktureinflüsse, also die Gültigkeit der kinematischen Näherung, sowie der Fehler in den Temperaturfaktoren.

Tab. 6.8: Vergleich der am Synchrotron gemessenen $|F_{\text{qf}}^{(\text{mea})}(hk.l)|$ mit denen aus den oben bestimmten Relaxationsparametern nach (3.8) und (3.9) berechneten $|F_{\text{qf}}^{(\text{cal})}(hk.l)|$, sowie die prozentuale Abweichung zwischen beiden Werten.

	Reflexe	$ F_{\text{qf}}^{(\text{mea})}(hk.l) $	$ F_{\text{qf}}^{(\text{cal})}(hk.l) $	$\frac{ F_{\text{qf}}^{(\text{mea})} - F_{\text{qf}}^{(\text{cal})} }{ F_{\text{qf}}^{(\text{mea})} } [\%]$
Synchrotron	00.2	0.1006	0.1006	0.0
	00.6	0.1814	0.1814	0.0
	00.10	0.1926	0.1927	0.1
	00.14	0.1473	0.1473	0.0

Die aus dem *least-squares*-Verfahren (s.o.) gewonnen Temperaturfaktoren können für den Polytyp 6H-SiC (s.u.) nicht reproduziert werden. Eine weitere Fehlerquelle ist die Kalibrierung der Integralintensitäten durch die Messung des nahezu perfekten Siliziumkristalls. Diese Ungenauigkeit wirkt sich auf alle hier bestimmten Strukturfaktorbeträge gleichermaßen aus. Die Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} ändern sich hierdurch um einen gleichen Faktor, d.h. das Verhältnis von η_{4H} zu ζ_{4H} bleibt konstant.

Vereinfacht wird hier jeweils der Mittelwert der Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} aus Tab. 6.6 gebildet und der daraus entstehende statistische Fehler errechnet. Diese Werte sind in Tab. 6.9 für die Temperaturfaktoren $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$ und $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$ angegeben. Für die Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* ($\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.211 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.257 \text{ \AA}^2$) ergeben sich folgende Mittelwerte und Fehler: $\eta_{4H} = 0.536 \pm 0.072$ und $\zeta_{4H} = 8.195 \pm 0.193$. Der Unterschied zwischen diesen und den in Tab. 6.9 gezeigten Werten ist nicht sehr groß und fällt in der weiteren Diskussion (Kap. 7) im Vergleich mit den Relaxationsparametern von CHENG und KÄCKELL (Tab. 3.3) nicht weiter ins Gewicht.

Tab. 6.9: Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} von 4H-SiC für $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$, und $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$.

$\eta_{4H} \cdot 10^4$	$\zeta_{4H} \cdot 10^4$
0.521 ± 0.001	8.689 ± 0.001

6.2 6H-SiC

Für die Messungen an dem Polytypen 6H-SiC wurden an einem nach dem originalen LELY-Verfahren gezüchteten Kristall verwendet. Alle Messungen wurden an der kohlenstoffdeterminierten Oberfläche dieser Probe durchgeführt. Die Oberflächennormale dieses Kristalls zeigte in $[000\bar{1}]$ -Richtung (*on axis*). Die Oberfläche der Probe hatte eine Ausdehnung von ca. 10 mm \times 10 mm, ihre Dicke betrug 0.46 mm.

6.2.1 Bestimmung der Strukturfaktoren

6.2.1.1 Drehanode

Die Bestimmung der Strukturfaktoren der an dem Drehanodensystem gemessenen „fastverbotenen“ Reflexe wurde analog zu dem Polytyp 4H-SiC (s. Abschnitt 6.1.1.1) durchgeführt. Wiederum wurde mit der Kupfer $K\alpha_1$ -Strahlung gemessen. Als Siliziumechreflex diente bei diesen Messungen der 111 Reflex, der unter Berücksichtigung des Polarisationsgemisches, eine intrinsische Integralintensität nach der dynamischen Theorie von 38.4867 μ rad besitzt. Die Absolutbeträge der Strukturfaktoren $|F_{\text{qf}}|$ wurden nach der auf 6H-SiC angepassten Gleichung (6.2) berechnet. Die geeichten Integralintensitäten $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$, sowie die daraus ermittelten Beträge der Strukturfaktoren für die vermessenen 6H-SiC Typ I-Reflexe sind in Tab. 6.10 aufgeführt. Typ II-Reflexe wurden nicht an der Drehanode gemessen. Zum einen stand am Drehanodensystem nur ein Vier-Kreis-Goniometer zur Verfügung an dem sich Drehungen um Netzebenenormalen von nichtsymmetrischen Reflexen zur Ermittlung von „umwegfreien“ Azimuten nicht ohne zusätzliche Hilfsmittel bewerkstelligen lassen und zum Anderen sind die Integralintensitäten der Typ II-Reflexe so gering, dass eine Messung an der Drehanode in einem gerechtfertigten Zeitaufwand nicht möglich erscheint.

Tab. 6.10: Geeichte Integralintensitäten $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ sowie der daraus bestimmten Absolutbeträge der Strukturfaktoren $|F_{\text{qf}}|$ der an dem Drehanodensystem gemessenen „fastverbotenen“ 6H-SiC Reflexe.

Reflex	$\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ [nrad]	$ F_{\text{qf}} $
$00.\bar{2}$	94.834	0.1065
$00.\bar{4}$	41.347	0.1004
$00.\bar{8}$	82.905	0.2071
00.10	7.177	0.0669
00.14	5.100	0.0648
00.16	83.863	0.2498

6.2.1.2 Synchrotron

Die Messungen der „fastverbotenen“ Reflexe des Polytyps 6H-SiC am Synchrotron verliefen analog zu denen von 4H-SiC (s. Abschnitt 6.1.1.2). Wiederum wurde der Einfluss der Ausläufer der Dreistrahl-*Peaks* korrigiert und eine Absoluteichung mit einem Siliziumreflex, durchgeführt. Als Eichreflex diente der Silizium 111 Reflex ($\rho_{\text{Si}}^{\text{mea}} = 1272095 \text{ cps} \cdot ^\circ$, $\rho_{\text{Si}}^{\text{dyn}} = 34.7808 \text{ } \mu\text{rad}$). Aus den geeichten Integralintensitäten wurden analog zu 4H-SiC, mit der auf 6H-SiC angepassten Gleichung (6.3), die Absolutbeträge der Struktur Faktoren der „fastverbotenen“ Reflexe bestimmt. Wie auch bei 4H-SiC wurden alle Messungen bei π -polarisiertem Röntgenstrahl durchgeführt.

In Tab. 6.11 sind die geeichten Integralintensitäten, sowie die daraus bestimmten Absolutbeträge der Struktur Faktoren der am Synchrotron vermessenen „fastverbotenen“ Typ I-Reflexe aufgeführt. Da zur Bestimmung der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ Typ I-Reflexe nicht ausreichen (s. Kap. 3.3.2.2), wurden zusätzlich Typ II-Reflexe vermessen. Diese asymmetrischen Reflexe wurden in der schief symmetrischen Geometrie gemessen, d.h. die Ebene, die der einfallende und der ausfallende Strahl bilden, durchschneidet die Netzebene senkrecht zur Projektion der Oberflächennormalen des Kristalls auf die Netzebene und damit ist der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel. Die geeichten Integralintensitäten, sowie die daraus bestimmten Absolutbeträge der Struktur Faktoren der „fastverbotenen“ 6H-SiC Typ II Reflexe sind in ebenfalls Tab. 6.11 tabelliert.

Tab. 6.11: Geeichte Integralintensitäten $\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ und Absolutbeträge der Struktur Faktoren $|F_{\text{qf}}|$ der am Synchrotron bei der Wellenlänge λ gemessenen „fastverbotenen“ 6H-SiC Typ I- und Typ II-Reflexe.

	Reflex	Wellenlänge λ [nm]	$\rho_{\text{qf}}^{\text{ga}}$ [nrad]	$ F_{\text{qf}} $
Typ I	$00.\overline{2}$	0.15383	4.431	0.1188
	$00.\overline{4}$		1.667	0.1088
	$00.\overline{8}$		2.296	0.2399
	$00.\overline{10}$		0.1259	0.0841
	$00.\overline{14}$	0.07123	0.6215	0.0988
	$00.\overline{16}$		4.3520	0.3045
	$00.\overline{20}$		0.6926	0.1735
	$00.\overline{22}$		1.743	0.3449
Typ II	$10.\overline{6}$	0.07123	1.114	0.0868
	$10.\overline{12}$		0.6245	0.0939
	$10.\overline{18}$		0.5234	0.1350
	$20.\overline{12}$		0.3001	0.0833

6.2.2 Bestimmung der Relaxationsparameter

Die Bestimmung der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ erfolgte in zwei Schritten. In einem ersten Schritt wurden $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ aus den Absolutbeträgen der Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Typ II-Reflexe (Tab. 6.11) ermittelt. Dies erfolgte durch Lösung des Gleichungssystems bestehend aus (3.22) und (3.23). Anschließend wurden die so bestimmten Relaxationsparameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ in (3.16) – (3.19) eingesetzt und aus diesen Gleichungen $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ bestimmt.

Abb. 6.7 zeigt graphisch die Lösungen der Gleichungen (3.22) und (3.23)^a für die gemessenen „fastverbotenen“ Typ II-Reflexe für die Relaxationsparameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$. Als Temperaturfaktoren wurden diejenigen nach ZYWIETZ *et al.* verwendet, also $\bar{B}_{11}^{\text{Si}} = \bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.211 \text{ \AA}^2$ und $\bar{B}_{11}^{\text{C}} = \bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.257 \text{ \AA}^2$.

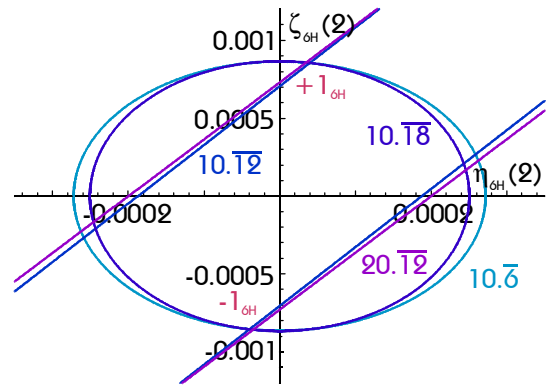
Jeweils zwei Reflexe bilden ein Gleichungssystem mit vier Lösungen, die in Abb. 6.7 durch die vier Schnittpunkte von jeweils zwei Graphen zweier Reflexe erkenntlich sind. Durch Verwendung von drei und mehr Reflexen ergeben sich zwei gemeinsame Lösungen aller verwendeten Reflexe die in Abb. 6.7 mit $+1_{6H}$ und -1_{6H} gekennzeichnet sind^b. Zur quantitativen Bestimmung von $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ wurden das Gleichungssystem, analog zu 4H-SiC, für jeweils zwei Typ II-Reflexe gelöst. Auch hier ist es günstig, jeweils einen Reflex, für den (3.22) gültig ist, mit einem nach (3.23) zu kombinieren, da der Schnittwinkel zwischen den Graphen näher an 90° und damit der Fehler in der Bestimmung der Relaxationsparameter kleiner ist. Die nach dem obigen Verfahren bestimmten Relaxationsparameter sind für das Modell $+1_{6H}$ in Tab. 6.12 aufgeführt. Als Mittelwerte ergeben sich für $\eta_{6H}(2) = -0.373 \cdot 10^{-4}$ und $\zeta_{6H}(2) = -8.560 \cdot 10^{-4}$. Durch Multiplikation der Parameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ mit -1 wird die Lösung des Modells -1_{6H} erhalten.

Die oben erhaltene Lösung für $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ wurde in die Gleichungen (3.16) – (3.19) der Typ I-Reflexe eingesetzt und mit diesen Gleichungen $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ ermittelt. Abb. 6.8 zeigt graphisch die Lösungen für die an der Drehanode gemessenen „fastverbotenen“ Reflexe und Abb. 6.9 für diejenigen am Synchrotron vermessenen. Wie schon bei 4H-SiC und bei den 6H-SiC Typ II-Reflexen wurde für jeweils zwei Reflexe das Gleichungssystem gelöst. In Tab. 6.13 aufgelistet sind die Lösungen für die Messungen an der Drehanode und in Tab. 6.14 diejenigen für die Synchrotronmessungen. Wiederum blieben solche Reflexkombinationen unberücksichtigt, bei denen der Schnittwinkel der Graphen einen sehr kleinen Winkel hatte.

^a Wie auch bei 4H-SiC wurden die Dispersionskorrekturen berücksichtigt, also wurden für Typ II-Reflexe (D.17) und (D.18) und für Typ I Reflexe (D.13) – (D.16) aus Anhang D verwendet.

^b Auch im Bereich von $\eta_{6H}(2) = \pm 2.5 \cdot 10^{-4}$ und $\zeta_{6H}(2) = \pm 2.2 \cdot 10^{-4}$ liegen die Schnittpunkte der einzelnen Graphen eng beieinander. Eine Weiterverfolgung dieser Lösung brachte kein konsistentes Ergebnis. Deshalb wird im Folgenden darauf nicht weiter eingegangen.

Abb. 6.7: Lösungen der Gleichungen (3.22) und (3.23) für die „fastverbotenen“ Reflexe 10.6, 10.12, 10.18 und 20.12, den Absolutbeträgen der Struktur Faktoren aus Tab. 6.11 und den Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.* (1996). $+1_{6H}$ und -1_{6H} kennzeichnen die zwei gemeinsamen Lösungen aller Gleichungen.



Als Mittelwerte ergaben sich für die Werte der Drehanode: $\eta_{6H}(1) = 1.562 \cdot 10^{-4}$, $\zeta_{6H}(1) = 1.563 \cdot 10^{-4}$ und für die Synchrotronwerte: $\eta_{6H}(1) = 2.043 \cdot 10^{-4}$, $\zeta_{6H}(1) = 1.966 \cdot 10^{-4}$. Bei Verwendung der Lösung für $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ mit dem umgekehrten Vorzeichen aus den Typ II-Reflexen, dreht sich auch das Vorzeichen für $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ um, wie in Kap. 4.1 dargelegt. Die Lösungsgraphen in Abb. 6.8 und Abb. 6.9 sind für die Lösung -1_{6H} gegenüber der Lösung $+1_{6H}$ am Koordinatenursprung punktgespiegelt. Der Unterschied zwischen dem Synchrotron und dem Drehanodenergebnis könnte zum einem die Ursache in der schlechteren Photonenstatistik der Drehanodenwerte haben und der fehlenden Möglichkeit zur Korrektur der Einflüsse von Mehrstrahlfällen. Zum anderen deutet das ungefähr gleiche Verhältnis zwischen dem aus den Drehanodenmessungen und dem aus den Synchrotronmessungen bestimmten $\eta_{6H}(1)$ (≈ 0.76), sowie dem aus den Drehanodenmessungen und dem aus den Synchrotronmessungen bestimmen $\zeta_{6H}(1)$ (≈ 0.79) auf eine Unsicherheit in der Absoluteichung der Integralintensitäten hin.

Tab. 6.12: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ bestimmt aus den Schnittpunkten der Graphen aus Abb. 6.7 für das Modell $+1_{6H}$, wobei folgende Temperaturfaktoren benutzt wurden: $\bar{B}_{11}^{Si} = \bar{B}_{33}^{Si} = 0.211 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{11}^C = \bar{B}_{33}^C = 0.257 \text{ \AA}^2$. Modell -1_{6H} erhält man durch Multiplikation der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ mit -1 .

	Reflexe	$\eta_{6H}(2) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(2) \cdot 10^4$
Synchrotron	$10.6 + 10.12$	-0.398	-8.548
	$10.6 + 20.12$	-0.349	-8.569
	$10.18 + 10.12$	-0.398	-8.549
	$10.18 + 20.12$	-0.350	-8.574

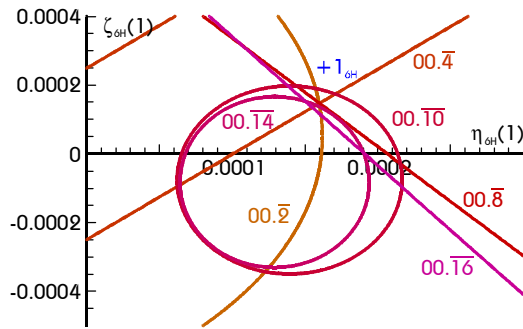


Abb. 6.8: Graphische Lösungen der Gleichungen (3.16) – (3.19) für die an der Drehanode vermessenen „fastverbotenen“ 6H-SiC Typ I Reflexe 00.2, 00.4, 00.8, 00.10, 00.14 und 00.16. Die gemeinsame Lösung ist mit $+1_{6H}$ gekennzeichnet.

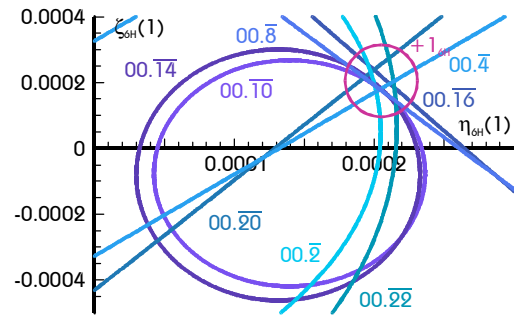


Abb. 6.9: Lösungen analog zu Abb. 6.8 der am Synchrotron vermessenen Reflexe 00.2, 00.4, 00.8, 00.10, 00.14, 00.16, 00.20 und 00.22. Der Bereich der gemeinsamen Lösung ist mit $+1_{6H}$ gekennzeichnet.

Im Gegensatz zu 4H-SiC konnte bei 6H-SiC keine höhere Genauigkeit bei der Bestimmung der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ durch Variieren der Temperaturfaktoren erreicht werden. Insbesondere ergab sich bei der Verwendung der bei 4H-SiC ermittelten Temperaturfaktoren $\bar{B}_{33}^{Si} = 0.411 \text{ \AA}^2$ und $\bar{B}_{33}^C = 0.545 \text{ \AA}^2$ eine Verschlechterung des Ergebnisses, d.h. die Schnittpunkte der Lösungsgraphen (Abb. 6.7, Abb. 6.8, Abb. 6.9) drifteten auseinander.

Tab. 6.13: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ bestimmt aus den Schnittpunkten der Graphen aus Abb. 6.8 (Drehanode) für das Modell $+1_{6H}$, wobei folgende Temperaturfaktoren benutzt wurden: $\bar{B}_{33}^{Si} = 0.211 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^C = 0.257 \text{ \AA}^2$. Modell -1_{4H} erhält man durch Multiplikation der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ mit -1 .

	Reflexe	$\eta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(1) \cdot 10^4$
Drehanode	$00.2 + 00.4$	1.597	1.46
	$00.2 + 00.8$	1.597	1.48
	$00.2 + 00.10$	1.573	1.90
	$00.2 + 00.14$	1.602	1.36
	$00.2 + 00.16$	1.610	1.11
	$00.4 + 00.8$	1.600	1.47
	$00.4 + 00.10$	1.708	1.74
	$00.4 + 00.14$	1.576	1.41
	$00.4 + 00.16$	1.550	1.35
	$00.8 + 00.10$	1.443	1.97
	$00.10 + 00.16$	1.384	1.97
	$00.14 + 00.16$	1.503	1.53

Da beim Polytyp $4H$ -SiC unterschiedliche Temperaturfaktoren der einzelnen Si- bzw. C-Atome vernachlässigt werden konnten, wurden diese auch bei $6H$ -SiC nicht berücksichtigt. Wie bei $4H$ -SiC kann auch bei $6H$ -SiC ausgeschlossen werden, dass keine atomaren Relaxationen auftreten und die nicht verschwindenden Strukturfaktorbeiträge der „fastverbotenen“ Reflexe einzig auf eine unterschiedliche thermische Auslenkung der einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome zurückzuführen sind (s. Kap 3.4).

Tab. 6.14: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ bestimmt aus den Schnittpunkten der Graphen aus Abb. 6.9 (Synchrotron) für das Modell $+1_{6H}$, wobei folgende Temperaturfaktoren benutzt wurden: $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.211 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.257 \text{ \AA}^2$. Modell -1_{4H} erhält man durch Multiplikation der Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ mit -1 .

	Reflexe	$\eta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(1) \cdot 10^4$
Synchrotron	$00.\bar{2} + 00.\bar{4}$	2.015	1.723
	$00.\bar{2} + 00.\bar{8}$	2.005	1.907
	$00.\bar{2} + 00.\bar{10}$	2.004	1.913
	$00.\bar{2} + 00.\bar{14}$	1.998	2.012
	$00.\bar{2} + 00.\bar{16}$	1.958	2.531
	$00.\bar{2} + 00.\bar{20}$	1.977	2.307
	$00.\bar{4} + 00.\bar{8}$	2.042	1.789
	$00.\bar{4} + 00.\bar{10}$	2.044	1.794
	$00.\bar{4} + 00.\bar{14}$	2.052	1.813
	$00.\bar{4} + 00.\bar{16}$	2.112	1.963
	$00.\bar{4} + 00.\bar{22}$	2.138	2.029
	$00.\bar{8} + 00.\bar{20}$	1.929	2.147
	$00.\bar{8} + 00.\bar{22}$	2.155	1.430
	$00.\bar{10} + 00.\bar{20}$	1.922	2.124
	$00.\bar{10} + 00.\bar{22}$	2.157	1.367
	$00.\bar{14} + 00.\bar{20}$	1.942	2.197
	$00.\bar{14} + 00.\bar{22}$	2.157	1.311
	$00.\bar{16} + 00.\bar{20}$	1.999	2.381
	$00.\bar{16} + 00.\bar{22}$	2.145	1.843
	$00.\bar{20} + 00.\bar{22}$	2.106	2.739

6.2.3 Eindeutige Bestimmung der Relaxationsparameter

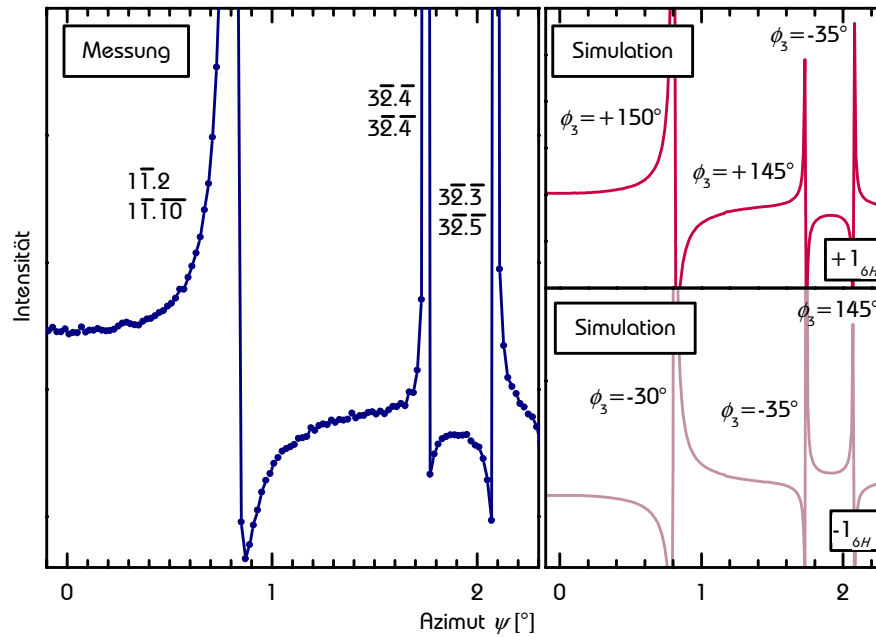


Abb. 6.10: Links: experimenteller ψ -scan des $6H$ -SiC $00.\bar{8}$ Reflexes, gemessen bei einer Wellenlänge $\lambda = 0.15383$ nm in π -Polarisation. Die MILLER-Indizes der starken **L** und **L'** sind neben den Umweg-Peaks angegeben. Rechts oben: Simulierter Umweg-Scan nach SHEN (4.21) des gleichen Reflexes des Modells $+1_{6H}$ mit Angabe der Phaseninvariante ϕ_3 des entsprechenden Umweg-Peaks. Rechts unten: Simulation für das Modell -1_{6H} .

Im Folgenden soll zwischen der Lösung $+1_{6H}$ und -1_{6H} zweifelsfrei unterschieden werden. Dies erfolgte analog zu $4H$ -SiC durch den Vergleich eines gemessenen ψ -scans eines „fast-verbotenen“ Reflexes mit den für die zwei Relaxationsmodelle $+1_{6H}$ und -1_{6H} simulierten ψ -scan. Abb. 6.10 zeigt diesen Vergleich.

Als primärer Reflex diente der „fastverbotene“ $6H$ -SiC $00.\bar{8}$ -Reflex. Die Simulation erfolgte nach der kinematischen Theorie von SHEN. In Abb. 6.10 ist deutlich zu erkennen, dass die asymmetrischen Ausläufer aller drei dargestellten Umwegreflexe des Modells $+1_{6H}$ mit denen des gemessenen ψ -scans übereinstimmen. In Tab. 6.15 sind die Phaseninvariante und der Drehsinn des Umwegreflexes durch die EWALD-Sphäre aufgeführt.

Tab. 6.15: Phaseninvariante ϕ_3 der Umwegreflexe **L** und **L'** der $6H$ -SiC Relaxationsmodelle $+1_{6H}$ und -1_{6H} .

L / L'	$+1_{6H}$	-1_{6H}
$1\bar{1}.2 / 11.10$ (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	$+140^\circ$	-40°
$3\bar{2}.\bar{4} / 32.\bar{4}$ (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	$+145^\circ$	-35°
$3\bar{2}.\bar{3} / 32.\bar{5}$ (<i>out</i> \rightarrow <i>in</i>)	-35°	145°

6.2.4 Fehlerabschätzung

Tab. 6.16: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ bestimmt aus den Messungen am Synchrotron mit den Temperaturfaktoren nach ZYWIETZ *et al.*

$\eta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\eta_{6H}(2) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(1) \cdot 10^4$	$\zeta_{6H}(2) \cdot 10^4$
2.043 ± 0.081	-0.373 ± 0.014	1.966 ± 0.082	-8.560 ± 0.007

Zur Abschätzung des Fehlers in der Bestimmung der Relaxationsparameter beim Siliziumkarbid-Polytypen 6H gilt das Gleiche wie bei 4H-SiC (s. Abschnitt 6.1.4). Auch bei 6H-SiC wurde der Mittelwert der Relaxationsparameter (Tab. 6.12, Tab. 6.13) bestimmt und der daraus entstehende statistische Fehler errechnet. Diese Werte sind in Tab. 6.16 aufgeführt. Für die aus den Messungen an der Drehanode bestimmten Relaxationsparameter gilt: $\eta_{6H}(1) = 1.562 \pm 0.085$ und $\zeta_{6H}(1) = 1.563 \pm 0.273$. Auch beim Polytyp 6H-SiC wurde aus den experimentell bestimmten Relaxationsparametern die Strukturfaktoren zurückgerechnet (Tab. 6.17). Die prozentuale Abweichungen liegen bei maximal 6.7 %. Bei den 00.l Reflexen besitzen die zwei höchstindexierten die größte Abweichung, was darin begründet sein könnte, dass sich ein Fehler in den Temperaturfaktoren bei diesen Reflexen am stärksten auswirkt.

Tab. 6.17: Vergleich der am Synchrotron gemessenen Strukturfaktorbeträge $|F_{\text{qf}}^{\text{mea}}(hk.l)|$ mit denen aus den oben bestimmten Relaxationsparametern nach (3.16) – (3.19) und (3.22) – (3.24) berechneten $|F_{\text{qf}}^{\text{cal}}(hk.l)|$, sowie die prozentuale Abweichung zwischen beiden Werten.

	Reflexe	$ F_{\text{qf}}^{\text{mea}}(hk.l) $	$ F_{\text{qf}}^{\text{cal}}(hk.l) $	$\frac{ F_{\text{qf}}^{\text{mea}} - F_{\text{qf}}^{\text{cal}} }{ F_{\text{qf}}^{\text{mea}} } [\%]$
Synchrotron	00. $\overline{2}$	0.1188	0.1184	0.3
	00. $\overline{4}$	0.1088	0.1072	1.5
	00. $\overline{8}$	0.2399	0.2407	0.3
	00. $\overline{10}$	0.0841	0.0814	3.2
	00. $\overline{14}$	0.0988	0.0972	1.6
	00. $\overline{16}$	0.3045	0.2967	2.6
	00. $\overline{20}$	0.1735	0.1852	6.7
	00. $\overline{22}$	0.3449	0.3306	4.1
	10. $\overline{6}$	0.0868	0.0868	0.0
	10. $\overline{12}$	0.0939	0.0953	1.5
	10. $\overline{18}$	0.1350	0.1342	0.6
	20. $\overline{12}$	0.0833	0.0822	1.3

6.3 Gitterparameter von 15R- und 21R-SiC

Die Bestimmung der a - und c -Gitterkonstanten der rhomboedrischen Siliziumkarbid Polytypen 15R und 21R^a erfolgte an Kristallen, die nach dem ursprünglichen LELY-Verfahren hergestellt wurden. Da die Oberflächennormale beider Proben parallel zur c -Achse orientiert ist (*on-axis*), wurde die c -Gitterkonstante durch Vermessung von symmetrischen Reflexen bestimmt, während zur Bestimmung der a -Gitterkonstante asymmetrische Reflexe nötig waren. Die a -Gitterkonstante wurde aus der c -Gitterkonstante und dem der Netzebenenabstand $d_{hk,l}$ des asymmetrischen Reflexes über folgende Gleichung (6.5) ermittelt:

$$a_{nR} = \sqrt{\frac{c_{nR}^2 d_{hk,l}^2 (-4h^2 - hk - 4k^2)}{-3c_{nR}^2 + 3d_{hk,l}^2 l^2}}, \quad (6.5)$$

In Tab. 6.18 sind die c -Gitterkonstante, sowie der vermessene Reflex und dessen Netzebenenabstand der Polytypen 15R- und 21R-SiC aufgeführt, in Tab. 6.19 das Gleiche für die a -Gitterkonstanten dieser Polytypen. Die Messungen wurden bei einer Temperatur von 293 K durchgeführt

Tab. 6.18: c -Gitterkonstante der SiC-Polytypen 15R und 21R. $d_{hk,l}$ ist der gemessene Netzebenenabstand des Reflexes 00.45 für 15R- und 00.63 für 21R-SiC (Temperatur: 293 K).

Polytyp	Reflex	$d_{hk,l}$ [nm]	c_{nR} [nm]
15R	00.45	0.0840151 $\pm 3 \cdot 10^{-7}$	3.78068 $\pm 1.5 \cdot 10^{-5}$
21R	00.63	0.0839863 $\pm 3 \cdot 10^{-7}$	5.29114 $\pm 2.1 \cdot 10^{-5}$

Tab. 6.19: a -Gitterkonstante der SiC-Polytypen 15R und 21R. $d_{hk,l}$ ist der gemessene Netzebenenabstand des Reflexes 11.30 für 15R- und 11.42 für 21R-SiC. a_{nR} wurde aus $d_{hk,l}$ und c_{nR} (Tab. 6.18) mit (6.5) bestimmt (Temperatur: 293 K).

Polytyp	Reflex	$d_{hk,l}$ [nm]	a_{nR} [nm]
15R	11.30	0.0975413 $\pm 7 \cdot 10^{-7}$	0.308096 $\pm 5 \cdot 10^{-6}$
21R	11.42	0.0975291 $\pm 9 \cdot 10^{-7}$	0.308157 $\pm 7 \cdot 10^{-6}$

^a Die Gitterparameter für 4H- und 6H-SiC wurden schon früher an der BOND-Apparatur des Instituts für Optik und Quantenelektronik bestimmt und in BAUER *et al.* (1998) veröffentlicht.

7 Diskussion der Ergebnisse

In diesem Kapitel findet die Diskussion der experimentellen Ergebnisse aus dem vorigen Kapitel statt. Der erste Abschnitt befasst sich mit den im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Gitterkonstanten von Siliziumkarbidpolytypen, sowie einem Vergleich dieser mit vorhandenen experimentellen und aus *ab-initio* Rechnungen ermittelten Literaturwerten. Im zweiten Abschnitt werden die in dieser Arbeit gewonnenen Relaxationsparameter erörtert. Insbesondere werden diese Parameter mit denen aus *ab-initio* Rechnungen von KÄCKELL *et al.* und CHENG *et al.* verglichen. Im letzten Abschnitt werden die absoluten Gitterparameter aus dem ersten Abschnitt mit den relativen Relaxationsparametern der Polytypen 4*H*- und 6*H*-SiC aus dem zweiten Abschnitt verbunden und daraus ein Modell eines modularen Aufbaus der Siliziumkarbid-Elementarzellen entworfen. Dieses Modell wird an den Polytypen 15*R*- und 21*R*-SiC überprüft und auf alle Polytypen erweitert.

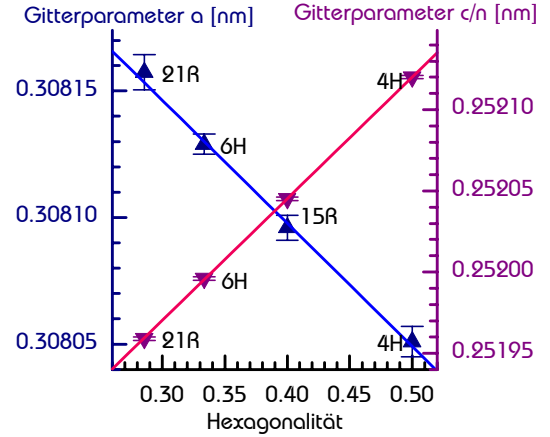
7.1 Gitterkonstanten

Tab. 7.1: Gitterparameter der am Institut für Optik und Quantenelektronik gemessenen SiC-Polytypen 4*H*, 6*H*, 15*R* und 21*R* (Raumtemperatur). *Y* bezeichnet das Kristallsystem (*H*, *R*), *n* die Stapelperiode.

Polytyp	Hexagonalität	a_{nY} [nm]	c_{nY} [nm]	$\frac{c_{nY}}{n}$ [nm]	$\frac{c_{nY}}{na_{nY}}$
4 <i>H</i> ^a	$\frac{1}{2}$	0.308051 $\pm 6 \cdot 10^{-6}$	1.00848 $\pm 4 \cdot 10^{-6}$	0.252120 $\pm 1 \cdot 10^{-6}$	0.818436 $\pm 1.6 \cdot 10^{-5}$
6 <i>H</i> ^a	$\frac{1}{3}$	0.308129 $\pm 4 \cdot 10^{-6}$	1.51198 $\pm 6 \cdot 10^{-6}$	0.251996 $\pm 1 \cdot 10^{-6}$	0.817826 $\pm 1.1 \cdot 10^{-5}$
15 <i>R</i>	$\frac{2}{5}$	0.308096 $\pm 5 \cdot 10^{-6}$	3.78068 $\pm 1.5 \cdot 10^{-5}$	0.252045 $\pm 1 \cdot 10^{-6}$	0.818073 $\pm 1.4 \cdot 10^{-5}$
21 <i>R</i>	$\frac{2}{7}$	0.308157 $\pm 7 \cdot 10^{-6}$	5.29114 $\pm 2.1 \cdot 10^{-5}$	0.251959 $\pm 1 \cdot 10^{-6}$	0.817632 $\pm 1.9 \cdot 10^{-5}$

^a BAUER *et al.* (1998)

Abb. 7.1: a - und c -Gitterparameter von 4H-, 6H-, 15R- und 21R-SiC aus Tab. 7.1 in Abhängigkeit von ihrer Hexagonalität.



In Tab. 7.1 sind die Gitterparameter der Siliziumkarbidpolytypen 4H, 6H, 15R und 21R, die ihm Rahmen dieser Arbeit an der BOND Apparatur JARD (s. Abschnitt 5.3) am Institut für Optik und Quantenelektronik bestimmt wurden, aufgeführt. Abb. 7.1 zeigt die a - und c -Gitterkonstanten in Abhängigkeit von der Hexagonalität. Beide zeigen ein lineares Verhalten, wobei a_{nY} mit steigender Hexagonalität abnimmt, c_{nY} hingegen zunimmt. Dieses gegenläufige Verhalten ist zu erwarten, da eine Streckung in der einen Richtung eine Stauchung in der anderen hervorruft. Eine lineare Regression ergab folgende Geradengleichung für a_{nY} :

$$a_{nY}(g_{\text{hex}}) = 0.308295\text{nm} - 4.916500 \cdot 10^{-4} \text{nm} \cdot g_{\text{hex}} \quad (7.1)$$

wobei g_{hex} den Grad der Hexagonalität darstellt. Der statistische Fehler der Konstante der Regression (d.h. $g_{\text{hex}} = 0$) beträgt $\pm 1.4 \cdot 10^{-5}$ nm und der Fehler der Steigung beläuft sich auf $\pm 3.70063 \cdot 10^{-5}$ nm. Für die lineare Anpassung der c -Gitterkonstanten ergab sich folgende Gleichung:

$$\frac{c_{nY}}{n}(g_{\text{hex}}) = 0.251745\text{nm} + 7.494187 \cdot 10^{-4} \text{nm} \cdot g_{\text{hex}} \quad (7.2)$$

Die Fehler dieser Regression sind folgende: Konstante: $\pm 2 \cdot 10^{-6}$ nm. Steigung: $\pm 6.2176 \cdot 10^{-6}$ nm. Unter der Annahme, dass das lineare Verhalten der Gitterparameter c und a sich auf alle Polytypen verallgemeinern lässt, ist es mit (7.1) und (7.2) möglich, die Gitterparameter aller anderer Polytypen zu ermitteln. Für die beiden Grenzfälle 3C-SiC (rein kubisch, $g_{\text{hex}} = 0$) und 2H-SiC (rein hexagonal, $g_{\text{hex}} = 1$) ergeben sich die in Tab. 7.2 dargestellten Werte, wobei Verhältnis $\frac{c_{3C}}{3a_{3C}}$ um ca. 0.01 % von dem zu erwartenden Wert von $\frac{1}{3}\sqrt{6}$ abweicht. Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur Siliziumkarbidpolytypen vermessen, deren Hexagonalität zwischen $\frac{2}{7}$ und $\frac{1}{2}$ liegen. Eine höhere Genauigkeit bei der linearen Kurvenanpassung ließe sich mit Polytypen erzielen, deren Hexagonalität nahe 0 oder nahe 1 läge (z.B.: 3C-, 2H-SiC). Leider stehen derzeit weder ausreichend große 3C- noch 2H-SiC Kristalle, die für eine BOND-Messung zu verwerten wären, zur Verfügung.

Tab. 7.2: Extrapolierte Gitterparameter der Polytypen 3C und 2H aus (7.1) und (7.2).

Polytyp	a_{nY} [nm]	c_{nY}/n [nm]
3C	$0.308295 \pm 1.4 \cdot 10^{-5}$	$0.251745 \pm 2 \cdot 10^{-6}$
2H	$0.307803 \pm 4.0 \cdot 10^{-5}$	$0.252494 \pm 7 \cdot 10^{-6}$

KRÄUBLICH *et al.* (2001) versuchten daher, die Gitterparameter von 3C-SiC aus einer dünnen verspannten 3C-SiC Schicht, die epitaktisch auf einem 6H-SiC Substrat mit einer MBE-Anlage abgeschieden wurde, mittels elastischer Konstanten zurückzurechnen. In hexagonaler Notation ergab sich für die Parameter a_{3C} und c_{3C} :

$$a_{3C} = 0.308276 \text{ nm} \pm 0.000004 \text{ nm} \quad c_{3C}/3 = 0.251706 \text{ nm} \pm 0.000003 \text{ nm},$$

wobei a_{3C} aus c_{3C} und dem Verhältnis $\frac{c_{3C}}{3a_{3C}} = \frac{1}{3}\sqrt{6}$ bestimmt wurde. Im Vergleich zu den Extrapolationen aus (7.1) und (7.2) ergibt sich eine Abweichung von 0.006 % in der a -Gitterkonstante und von 0.015 % in der c -Gitterkonstante. Beide Werte sind jeweils kleiner als die durch (7.1) und (7.2) bestimmten. Der größte Fehler bei dieser Methode dürfte in den Ungenauigkeiten bei den vorhandenen elastischen Konstanten für Siliziumkarbid liegen.

In Tab. 7.1 ist auch das Verhältnis der auf die Stapelperiode normierten c -Gitterkonstante zur a -Gitterkonstante $c_{nY}/(na_{nY})$ angegeben. Diese Werte sind über die Hexagonalität in Abb. 7.2 aufgetragen. Da bei *ab-initio* Rechnungen die absoluten Gitterparameter um einige wenige Prozent im Vergleich zu den experimentellen Werten abweichen (Tab. 7.3), sich diese Abweichungen beim $c_{nY}/(na_{nY})$ Verhältnis jedoch wieder aufheben^a, eignet dieses Verhältnis besonders für einen Vergleich der experimentellen mit den berechneten Gitterparametern. Auch das $c_{nY}/(na_{nY})$ Verhältnis zeigt einen linearen Verlauf^b in Abhängigkeit von der Hexagonalität. Aus der linearen Regression ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{c_{nY}}{na_{nY}}(g_{\text{hex}}) = 0.816574 + 0.003735 \cdot g_{\text{hex}} \quad (7.3)$$

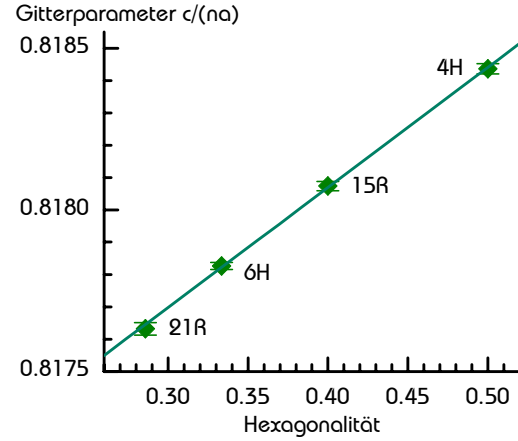
mit dem Fehlern der Konstante von $\pm 3.8 \cdot 10^{-5}$ und in der Steigung von $\pm 1.0 \cdot 10^{-5}$.

^a Eine Begründung für dieses Verhalten ist in der Dissertation von P. KÄCKELL (KÄCKELL (1996)) im Abschnitt III.2.3 (S. 31) zu finden.

^b Im Allgemeinen ergibt die Division zweier Geradengleichungen nicht wieder eine Gerade. Für $a \ll b$, $c \ll d$ und $0 \leq x \leq 1$ können aber nach der Reihenentwicklung alle Ordnungen, höher als die erste, vernachlässigt werden:

$$\frac{ax+b}{cx+d} \approx \frac{b}{d} + \left(-\frac{bc}{d^2} + \frac{a}{d}\right)x + \left(\frac{bc^2}{d^3} - \frac{ac}{d^2}\right)x^2 + O[x^3]$$

Abb. 7.2: $c/(na)$ -Verhältnis der SiC-Polytypen 4H, 6H, 15R und 21R aus Tab. 7.1 in Abhängigkeit von ihrer Hexagonalität.



Ein Anhaltspunkt für die Qualität der Regressionsgeraden ist die Abweichung für $g_{\text{hex}} = 0$ von dem Verhältnis $c_{3C}/(3a_{3C})$, da a_{3C} und c_{3C} in der kubischen Modifikation nicht unabhängig voneinander sind, sondern fest durch das Verhältnis $\frac{c_{3C}}{3a_{3C}} = \frac{1}{3}\sqrt{6} \approx 0.816496581$ miteinander verknüpft sind. Diese Abweichung beträgt ca. 0.01 %. Andererseits kann man dieses feste Verhältnis auch als weiteren Datenpunkt für die Regression benutzen. Mit dem festen Wert $\frac{c_{3C}}{3a_{3C}} = \frac{1}{3}\sqrt{6}$ für $g_{\text{hex}} = 0$ ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{c_{nY}}{na_{nY}}(g_{\text{hex}}) = 0.816497 + 0.003937 \cdot g_{\text{hex}} \quad (7.4)$$

Der Fehler in der Steigung beträgt $\pm 1.8 \cdot 10^{-5}$. Der Unterschied dieser im Vergleich zu (7.3) beläuft sich auf ca. 5 %. Falls allerdings die Abweichung vom erwarteten Wert bei $g_{\text{hex}} = 0$ auf einen systematischen Fehler zurückzuführen ist, der bei allen Messpunkten in die gleiche Richtung zeigt, ist (7.4) eine Verschlechterung gegenüber (7.3), da ein solcher Fehler die Steigung unverändert lässt.

Ein Vergleich der Gitterparameter a_{nY} , c_{nY} und $c_{nY}/(na_{nY})$ von verschiedenen Autoren und dieser Arbeit findet sich in Tab. 7.3. Bei KÄCKELL (KÄCKELL *et al.* (1994)), PARK (PARK *et al.* (1994)) und CHENG (CHENG *et al.* (1990)) handelt es sich um aus *ab-initio* Rechnungen gewonnene Werte. Alle anderen Parameter sind experimentell ermittelt. Mit LB sind solche Daten gekennzeichnet, die aus dem LANDOLT-BÖRNSTEIN (1988) entnommen sind, also von verschiedenen Autoren stammen, die jeweils als Fußnote angegeben sind. Weitere experimentelle Gitterparameter stammen aus der Publikation von GOL'DSHMIDT (GOL'DSHMIDT *et al.* (1982)). GOL'DSHMIDT bestimmte die Gitterparameter a_{nY} und c_{nY} nicht absolut, sondern relativ aus dem Winkelabstand $\Delta\theta$ zwischen einem Reflex des zu untersuchenden Polytyps und dem 00.18 Reflex von 6H-SiC. Zur Berechnung des Netzebenenabstandes dieses Reflexes benutzte GOL'DSHMIDT die Gitterkonstante c_{6H} aus TAYLOR *et al.* (1960). Ebenso wie in der vorliegenden Arbeit ergibt sich bei GOL'DSHMIDT eine Linearität der Parameter a_{nY} , c_{nY} und $c_{nY}/(na_{nY})$ in Abhängigkeit von der Hexagonalität. Eine lineare Anpassung durch diese Werte ergibt für a : $a_{nY}(g_{\text{hex}}) = 0.30828 \text{ nm} - 5.39537 \cdot 10^{-4} \text{ nm} \cdot g_{\text{hex}}$, für c/n : $c_{nY}/n(g_{\text{hex}}) = 0.25171 \text{ nm} + 7.39749 \cdot 10^{-4} \text{ nm} \cdot g_{\text{hex}}$ und für $c/(na)$: $c_{nY}/(na)(g_{\text{hex}}) = 0.81648 + 0.003872 \cdot g_{\text{hex}}$.

Tab. 7.3: Gitterparameter einiger ausgesuchter Polytypen bei Raumtemperatur. Bei KÄCKELL, PARK und CHENG handelt es sich um aus *ab-initio* Rechnungen gewonnene Daten, alle anderen sind experimentell bestimmt. Die Werte bei LB sind dem LANDOLT-BÖRNSTEIN, New Series, Group III, Vol. 17 entnommen.

Polytyp	Hex.		a_{nY} [nm]	$\frac{c_{nY}}{n}$ [nm]	$\frac{c_{nY}}{na_{nY}}$
3C	0	LB ^a	0.30827	0.25170	0.81650
		KÄCKELL	0.3034	0.2477	0.8165
		PARK	0.3082	0.2516	0.8165
8H	$\frac{1}{4}$	GOL'DSHMIDT	0.30813	0.25189	0.81747
		LB ^b	0.3079	0.2518	0.8179
21R	$\frac{2}{7}$	diese Arbeit	0.308157	0.251959	0.817632
		GOL'DSHMIDT	0.30812	0.25191	0.81759
6H	$\frac{1}{3}$	diese Arbeit	0.308129	0.251996	0.817826
		GOL'DSHMIDT	0.30811	0.25196	0.81776
		LB ^a	0.30806	0.25196	0.81788
		KÄCKELL	0.3033	0.2480	0.8177
		PARK	0.3077	0.2518	0.8183
		CHENG	—	—	0.8176
33R	$\frac{4}{11}$	GOL'DSHMIDT	0.30808	0.25198	0.81788
15R	$\frac{2}{5}$	diese Arbeit	0.308096	0.252045	0.818073
		GOL'DSHMIDT	0.30807	0.25200	0.81800
		CHENG	—	—	0.8179
27R	$\frac{4}{9}$	GOL'DSHMIDT	0.30803	0.25204	0.81823
4H	$\frac{1}{2}$	diese Arbeit	0.308051	0.252120	0.818436
		GOL'DSHMIDT	0.30800	0.25207	0.81842
		LB ^b	0.3073	0.2513	0.8178
		KÄCKELL	0.3032	0.2482	0.8185
		PARK	0.3069	0.2526	0.8230
		CHENG	—	—	0.8182
2H	1	LB ^c	0.30763	0.25240	0.82047
		KÄCKELL	0.3031	0.2480	0.8185
		PARK	0.3072	0.2521	0.8205
		CHENG	—	—	0.8202

^a TAYLOR *et al.* (1960)

^b WYCKOFF (1963)

^c ADAMSKI *et al.* (1959)

Zwischen den Gitterparametern, die im Rahmen dieser Arbeit ermittelt wurden, und denen von GOL'DSCHMIDT bestehen Differenzen, die kleiner als 0.02 % sind. Die älteren Parametern, die aus LANDOLT-BÖRNSTEIN entnommen wurden und in der Zeit zwischen 1959 und 1963 entstanden, weichen im größeren Maße von gemessenen Werten dieser Arbeit bzw. der Regressionsgeraden (7.3) ab. Die Differenzen betragen bis zu 0.09 %, die 4H-SiC Parameter weichen sogar um 0.24 % (a_{4H}) und 0.32 % (c_{4H}) ab. Beide Werte sind jeweils kleiner als (7.3) erwarten lässt.

In Abb. 7.3 ist das $c_{nY}/(na_{nY})$ Verhältnis in Abhängigkeit von der Hexagonalität für alle Autoren aus Tab. 7.3, sowie die Regressionsgerade (7.3) aufgetragen. Auch hier ist, wie schon bei a_{nY} und c_{nY} , die Übereinstimmung mit den Werten von GOL'DSCHMIDT recht gut, die mit den experimentellen Daten aus dem LANDOLT-BÖRNSTEIN nur bei 6H-SiC befriedigend, bei 8H-SiC ist das Verhältnis zu groß, d.h. diese Struktur ist entlang ihrer c -Achse zu stark gedehnt, bei 4H-SiC verhält es sich umgekehrt. Der 2H-SiC Wert ist etwas zu groß. Der 3C-Wert aus dem LANDOLT-BÖRNSTEIN gibt, ebenso wie der von PARK, das feste Verhältnis von $\frac{1}{3}\sqrt{6}$ wieder. Bei den aus *ab-initio* Rechnungen erhaltenen Werten ist die Übereinstimmung bei KÄCKELL bei den Polytypen 4H- und 6H-SiC sehr gut, die Abweichungen sind kleiner als 0.02 %. Der 2H-Wert fällt jedoch aus dem Rahmen, die Abweichung beträgt ca. 0.2 % gegenüber der Regressionsgeraden. Bei Park ist sowohl bei 6H- (0.06 %) als auch bei 2H-SiC (0.02 %) die Struktur in c -Richtung zu stark gedehnt, der 4H-SiC Wert (nicht im Bild) ist viel zu groß und weicht um mehr als 0.5 % von dem Wert dieser Arbeit ab.

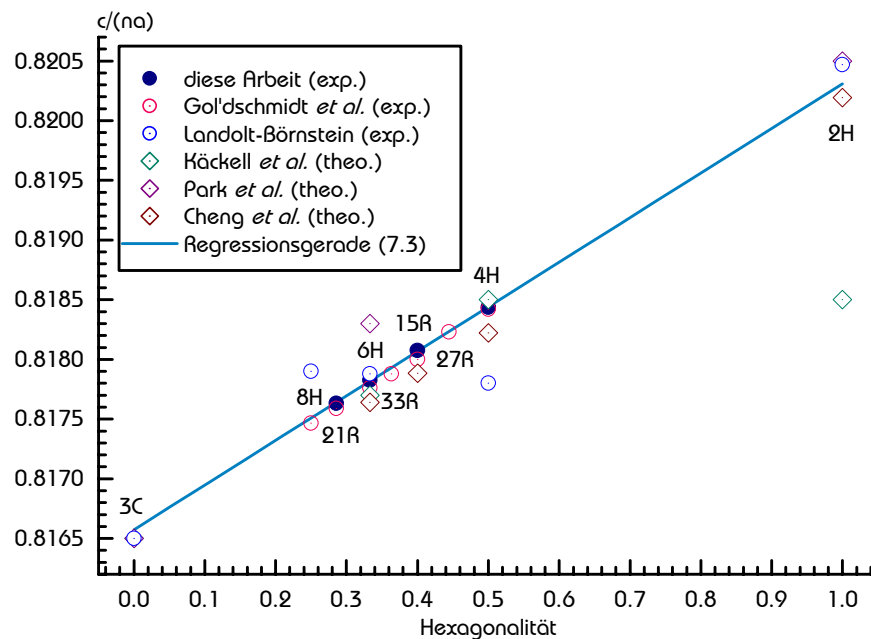


Abb. 7.3: $c/(na)$ -Verhältnis in Abhängigkeit von der Hexagonalität mit den Werten aus Tab. 7.3. Die durchgezogene Line stellt die Regressionsgerade (7.3) dar.

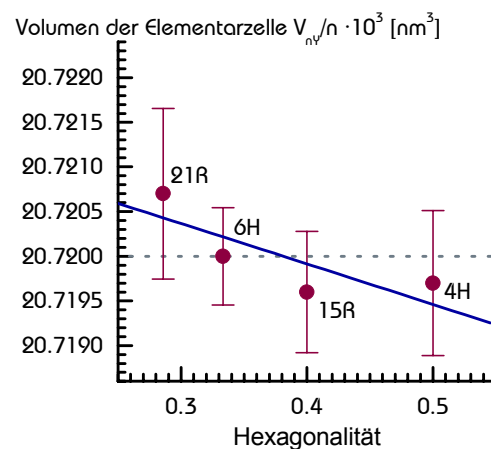
Tab. 7.4: Volumen der Elementarzellen V_{nY}/n bezogen auf die Stapelperiode der SiC-Polytypen 4H, 6H, 15R und 21R.

Polytyp	Hexagonalität	$\frac{V_{nY}}{n} [\text{nm}^3]$
4H	$\frac{1}{2}$	$0.0207197 \pm 8.1 \cdot 10^{-7}$
6H	$\frac{1}{3}$	$0.0207200 \pm 5.4 \cdot 10^{-7}$
15R	$\frac{2}{5}$	$0.0207196 \pm 6.8 \cdot 10^{-7}$
21R	$\frac{2}{7}$	$0.0207207 \pm 9.4 \cdot 10^{-7}$

Die Werte von CHENG passen sehr gut ins Bild, wobei sie alle etwas zu klein sind, die Steigung aber korrekt wiedergeben. Die Differenzen zu den Werten dieser Arbeit liegen bei ca. 0.03 %. Von allen hier diskutierten theoretischen Modellen unterstützt das von CHENG am besten die in dieser Arbeit gemachte Aussage von der Linearität des $c_{nY}/(na_{nY})$ -Verlaufes über die Hexagonalität.

Eine weitere Strukturgröße ist das Volumen der Elementarzelle bezogen auf ein Si-C-Paar. Dieses Volumen berechnet sich zu $\frac{\sqrt{3}}{2n} c_{nY} a_{nY}^2$. Da die a - und die c -Gitterparameter gegenläufiges Verhalten zeigen, ändert sich das Volumen nur schwach. In Tab. 7.4 sind die genormten Volumina aus dem im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Gitterparameter aufgelistet und in Abb. 7.4 gezeigt. Innerhalb der Fehlergrenzen sind mehrere Interpretationen möglich. Zum einen kann ein konstantes Verhalten in Abhängigkeit von der Hexagonalität angenommen werden. Es ergäbe sich ein mittleres Volumen von 0.0207200 nm^3 . Das Volumen wäre demnach eine Erhaltungsgröße. Zum anderen wäre auch eine Abnahme mit steigender Hexagonalität möglich (blaue Linie in Abb. 7.4) bei der das Volumen aus (7.1) und (7.2) berechnet wurde. Aus den Rechnungen von KÄCKELL ergibt sich ein fallender Verlauf, während bei GOL'DSHMIDT dieser Verlauf erst bei 6H-SiC einsetzt.

Abb. 7.4: Volumen der Elementarzellen V_{nY}/n bezogen auf die Stapelperiode von 4H-, 6H-, 15R- und 21R-SiC in Abhängigkeit von der Hexagonalität. Die gestrichelte Linie markiert den Mittelwert der vier Volumina ($\bar{V} = 0.0207200 \text{ nm}^3$), bei der blauen Linie wurde das Volumen aus (7.2) und (7.3) bestimmt.



7.2 Relaxationsparameter

Mit der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Methode der „fastverbotenen“ Reflexe können nur die Linearkombinationen $\eta(i)$ und $\zeta(i)$ von den Abweichungen der einzelnen Silizium- bzw. Kohlenstoffatome aus den Ideallagen ($\delta(i)$ und $\epsilon(i)$) bestimmt werden. Dies bedeutet, dass die gemessenen Linearkombinationen jeweils die Kohlenstoffteilzelle bzw. Siliziumteilzelle vollständig beschreiben, die absolute Verschiebung der zwei Teilzellen gegeneinander jedoch nicht. Da die Parameter $\eta(i)$ und $\zeta(i)$ nicht sehr anschaulich sind, werden im Folgenden die schon in Kapitel 3 eingeführten Größen $\Delta d_{nH}^X(j)/d_0^{nH}$, sowie die daraus abgeleiteten Strukturgrößen $\Delta L_{nH}(i; j)/L_0^{nH}$ und $\Delta l_{nH}(i; j)/l_0^{nH}$ diskutiert (Abb. 7.5). Diese sind im einzelnen:

- Für 4H-SiC ist die relative Änderung der Dicke der Silizium-Kohlenstoff-Doppellage bezogen auf die Siliziumatome gegeben durch (vgl. (3.10) und (3.11)):

$$\frac{\Delta d_{4H}^{\text{Si}}(1)}{d_0^{4H}} = \frac{d_{4H}^{\text{Si}}(1) - \frac{1}{4}c_{4H}}{\frac{1}{4}c_{4H}} = -4\eta_{4H} \quad (7.5)$$

und bezogen auf die Kohlenstoffatome:

$$\frac{\Delta d_{4H}^{\text{C}}(1)}{d_0^{4H}} = \frac{d_{4H}^{\text{C}}(1) - \frac{1}{4}c_{4H}}{\frac{1}{4}c_{4H}} = -4\zeta_{4H}, \quad (7.6)$$

wobei $d_0^{4H} = \frac{1}{4}c_{4H}$ gilt. Da $d_{4H}^X(1) + d_{4H}^X(2) = \frac{1}{2}c_{4H}$ wechselt für $j = 2$ das Vorzeichen.

Aus diesen Parametern lassen sich folgende Größen ableiten:

- Die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslängen in c -Richtung vom j -ten Siliziumatom bis zum j -ten Kohlenstoffatom ($L_0^{4H} = \frac{3}{16}c_{4H}$, $i \neq j$):

$$\frac{\Delta L_{4H}(i; j)}{L_0^{4H}} = \frac{L_{4H}(i) - L_{4H}(j)}{\frac{3}{16}c_{4H}} = \frac{d_{4H}^{\text{Si}}(i) - d_{4H}^{\text{C}}(i)}{\frac{3}{16}c_{4H}} \quad (7.7)$$

- Die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslängen vom j -ten Kohlenstoffatom bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die [0001]-Richtung:

$$\frac{\Delta l_{4H}(i; j)}{l_0^{4H}} = \frac{l_{4H}(i) - l_{4H}(j)}{\frac{1}{16}c_{4H}} = \frac{d_{4H}^{\text{C}}(i) - d_{4H}^{\text{Si}}(j)}{\frac{1}{16}c_{4H}} \quad (7.8)$$

wobei $l_0^{4H} = \frac{1}{16}c_{4H}$ und $i \neq j$ gilt.

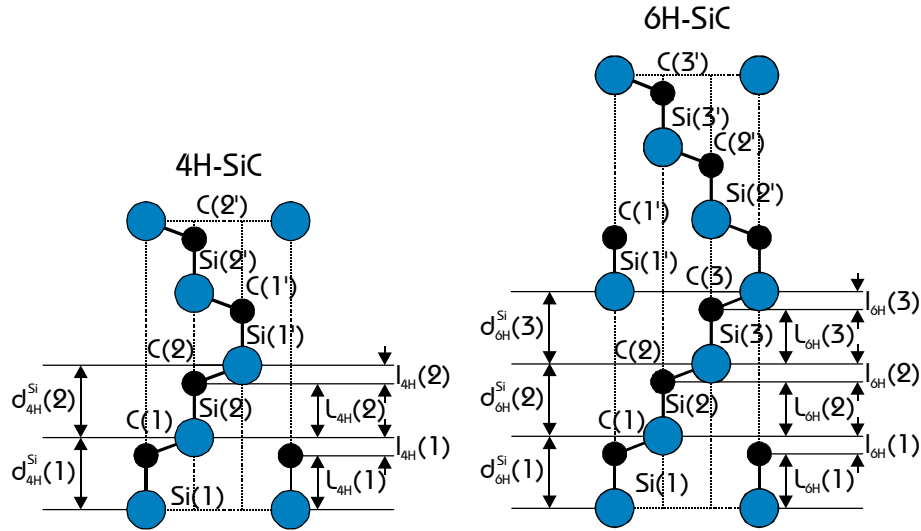


Abb. 7.5: Elementarzellen von 4H- und 6H-SiC: $d_{nH}^{\text{Si}}(j)$ bezeichnet die Dicke einer Si-C-Doppellage vom j -ten bis zum $j+1$ -ten Si-Atom. $L_{nH}(j)$ die Si-C Bindungslänge in c -Richtung vom j -ten Si-Atom bis zum j -ten C-Atom und $l_{nH}(j)$ den Abstand des j -ten C-Atoms zum $(j+1)$ -ten Si-Atom projiziert auf die $[0001]$ -Richtung. $d_{nH}^{\text{C}}(j)$ ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Analog lassen sich die Gleichungen für 6H-SiC bestimmen. Es ergibt sich für die Dicke der Si-C-Doppellage mit $d_0^{6H} = \frac{1}{6} c_{6H}$ (vgl. (3.26)):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(1)}{d_0^{6H}} &= 3[\eta_{6H}(1) + \eta_{6H}(2)], & \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(2)}{d_0^{6H}} &= -6\eta_{6H}(1) \\ \frac{\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(3)}{d_0^{6H}} &= 3[\eta_{6H}(1) - \eta_{6H}(2)] \end{aligned} \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta d_{6H}^{\text{C}}(1)}{d_0^{6H}} &= 3[\zeta_{6H}(1) + \zeta_{6H}(2)], & \frac{\Delta d_{6H}^{\text{C}}(2)}{d_0^{6H}} &= -6\zeta_{6H}(1) \\ \frac{\Delta d_{6H}^{\text{C}}(3)}{d_0^{6H}} &= 3[\zeta_{6H}(1) - \zeta_{6H}(2)] \end{aligned} \quad (7.10)$$

Für die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge in c -Richtung vom j -ten Si-Atom bis zum j -ten C-Atom ergibt sich für 6H-SiC ($L_0^{6H} = \frac{3}{24} c_{6H}$, $i \neq j$):

$$\frac{\Delta L_{6H}(i, j)}{L_0^{6H}} = \frac{L_{6H}(i) - L_{6H}(j)}{\frac{3}{24} c_{6H}} = \frac{d_{6H}^{\text{Si}}(i) - d_{6H}^{\text{C}}(i)}{\frac{3}{24} c_{6H}} \quad (7.11)$$

(7.11) ist nur für zyklisch aufsteigende i und j gültig, also für die i - j -Paare (1;2), (2;3) und (3;1) Für die relativen Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge vom j -ten Kohlenstoffatom bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die $[0001]$ -Richtung ergeben sich für diesen Polytyp:

$$\frac{\Delta l_{6H}(i; j)}{l_0^{6H}} = \frac{l_{6H}(i) - l_{6H}(j)}{\frac{1}{24} c_{6H}} = \frac{d_{6H}^C(i) - d_{6H}^{Si}(j)}{\frac{1}{24} c_{6H}} \quad (7.12)$$

wobei $l_0^{6H} = \frac{1}{24} c_{6H}$ und $i \neq j$ gilt. Wie (7.11) ist (7.12) nur für zyklisch aufsteigende i und j gültig^a.

In Tab. 7.5 sind diese Relaxationsparameter für den Polytyp 4H-SiC im Vergleich mit denjenigen, die aus den *ab-initio* Rechnungen von KÄCKELL und CHENG bestimmt wurden, dargestellt und in Tab. 7.6 diejenigen für 6H-SiC.

Tab. 7.5: Vergleich der 4H-SiC Parameter $\Delta d_{4H}^X(j)/d_0^{4H}$, $\Delta L_{4H}(i; j)/L_0^{4H}$ und $\Delta l_{4H}(i; j)/l_0^{4H}$ dieser Arbeit mit den Werten von KÄCKELL und CHENG.

	$\frac{\Delta d_{4H}^{Si}(1)}{d_0^{4H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{4H}^{Si}(2)}{d_0^{4H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	-2.084 ±0.004	2.084 ±0.004
KÄCKELL	-8.4	8.4
CHENG	-4.0	4.0
	$\frac{\Delta d_{4H}^C(1)}{d_0^{4H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{4H}^C(2)}{d_0^{4H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	-34.756 ±0.004	34.756 ±0.004
KÄCKELL	-28.4	28.4
CHENG	-28.0	28.0
	$\frac{\Delta L_{4H}(1;2)}{L_0^{4H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta L_{4H}(2;1)}{L_0^{4H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	43.563 ±0.008	-43.563 ±0.008
KÄCKELL	26.7	-26.7
CHENG	32.0	-32.0
	$\frac{\Delta l_{4H}(1;2)}{l_0^{4H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta l_{4H}(2;1)}{l_0^{4H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	-147.360 ±0.023	147.360 ±0.023
KÄCKELL	-147.2	147.2
CHENG	-128.0	128.0

^a Für die i - j -Paare (2;1), (3;2) und (1;3) gilt $\Delta L_{6H}(i; j)/L_0^{6H} = -d_{6H}^{Si}(j) - d_{6H}^C(j)/(\frac{1}{24} c_{6H})$

Tab. 7.6: Vergleich der 6H-SiC Parameter $\Delta d_{6H}^x(j)/d_0^{6H}$, $\Delta L_{6H}(i;j)/L_0^{6H}$ und $\Delta l_{6H}(i;j)/l_0^{6H}$ mit den Werten von KÄCKELL und CHENG.

	$\frac{\Delta d_{6H}^{Si}(1)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{6H}^{Si}(2)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{6H}^{Si}(3)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	5.010 ± 0.247	-12.258 ± 0.486	7.248 ± 0.247
KÄCKELL	1.8	-9.0	7.2
CHENG	2.4	-10.8	8.4
	$\frac{\Delta d_{6H}^C(1)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{6H}^C(2)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta d_{6H}^C(3)}{d_0^{6H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	-19.782 ± 0.247	-11.796 ± 0.492	31.578 ± 0.247
KÄCKELL	-18.6	-9.0	27.6
CHENG	-19.8	-10.8	30.6
	$\frac{\Delta L_{6H}(1;2)}{L_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta L_{6H}(2;3)}{L_0^{6H}} \cdot 10^4$	$\frac{\Delta L_{6H}(3;1)}{L_0^{6H}} \cdot 10^4$
diese Arbeit	33.056 ± 0.465	-0.616 ± 0.922	-32.440 ± 0.465
KÄCKELL	27.2	0.0	-27.2
CHENG	29.6	0.0	-29.6
	$\frac{\Delta l_{6H}(1;2)}{l_0^{6H}}$	$\frac{\Delta l_{6H}(2;3)}{l_0^{6H}}$	$\frac{\Delta l_{6H}(3;1)}{l_0^{6H}}$
diese Arbeit	-30.096 ± 1.397	-76.176 ± 2.766	106.272 ± 1.397
KÄCKELL	-38.4	-64.8	103.2
CHENG	-36.0	-76.8	112.8

Bei allen Parametern der beiden Polytypen stimmen die Vorzeichen der gemessenen Werte mit denen aus *ab-initio* Rechnungen bestimmten überein. Auch quantitativ ergibt sich eine gute Übereinstimmung der experimentellen Werte mit den zwei theoretischen Modellen, wobei die experimentellen 6H-SiC Werte näher an den Modellen von KÄCKELL und CHENG liegen als diejenigen von 4H-SiC. Die Differenzen zwischen den drei Modellen sind in etwa vergleichbar. Aus den gemessenen Werten lässt sich im Vergleich zu den gerechneten weder eine Präferenz für das Modell KÄCKELL noch eine für das Modell CHENG ableiten.

Bei 4H-SiC ist $\Delta d_{4H}^{Si}(1)/d_0^{4H}$ negativ und demnach $\Delta d_{4H}^{Si}(2)/d_0^{4H}$ positiv, d.h. die Dicke der ersten Doppellage ist kleiner als die der zweiten bezogen auf die Siliziumatome. Werden die Kohlenstoffatome als Bezugspunkt gewählt, so gilt, dass der Abstand vom Atom C(1) zum Atom C(2) kleiner ist als derjenige von C(2) zu C(1'). Da $\Delta L_{4H}(1;2)/L_0^{4H}$ einen positiven

Wert besitzt, ist die Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge in c -Richtung in der kubischen Umgebung kleiner als in der hexagonalen. Aus dem Wert von $\Delta l_{4H}(1;2)/l_0^{4H}$ lässt sich ableiten, dass die Bindungslänge projiziert auf die [0001]-Richtung zwischen den Atomen C(1) und Si(2) gegenüber derjenigen zwischen C(2) und Si(1') um etwa 1.5 % gestaucht ist.

Bei dem Polytypen $6H$ ist, bezogen auf die Siliziumatome, die erste und die dritte Doppellage gestreckt, die zweite gestaucht. $\Delta d_{6H}^C(1)/d_0^{6H}$ und $\Delta d_{6H}^C(3)/d_0^{6H}$ besitzen negative Werte, d.h. die erste und die dritte Doppellage in bezug auf die Kohlenstoffatome ist gestaucht, während die mittlere gestreckt ist ($\Delta d_{6H}^C(2)/d_0^{6H} > 0$). Aus den *ab-initio* Rechnungen von KÄCKELL und CHENG ergibt sich, dass die Silizium-Kohlenstoff-Bindungslängen in c -Richtung in kubischer Umgebung, also zwischen den Atomen Si(2) und C(2) und zwischen Si(3) und C(3), gleich lang sind ($\Delta L_{6H}(2;3)/L_0^{6H} = 0$). Innerhalb der Fehlergrenzen wird dieses Verhalten auch durch die experimentellen Werte bestätigt, da für diese gilt: $\Delta L_{6H}(2;3) \ll \Delta L_{6H}(1;2)$ und $\Delta L_{6H}(2;3) \ll \Delta L_{6H}(1;3)$. Zumindest lässt sich daraus ableiten, dass der Längenunterschied dieser Bindungslängen zwischen den zwei kubischen Umgebungen bedeutend kleiner ist, als zwischen einer kubischen und einer hexagonalen Umgebung. Dies bedeutet, dass der Einfluss dritter und weiter entfernter Nachbaratome keinen oder nur einen sehr geringen Einfluss auf die Relaxationsparameter hat. Dies lässt sich folgendermaßen verdeutlichen: Die Atome Si(2) und Si(3) befinden sich auf äquivalenten Gitterplätzen. Ihre Umgebungen sind – unter Vernachlässigung der sehr kleinen atomaren Relaxationen – bis zum zweiten Nachbaratom identisch. Dies zeigt sich in Abb. 7.5. Geht man von Atom Si(2) nach „unten“, so ist der erste Nachbar Atom C(1), der zweite Si(1) und der dritte C(3'). Für Si(3) ist der erste Nachbar C(2), der zweite Si(2) und der dritte C(1). Die jeweils dritten Nachbaratome C(3') und C(1) sind aber nicht auf äquivalenten Atompositionen, da C(1) einer Doppellage mit hexagonaler Umgebung angehört, C(3') dagegen einer mit kubischer Umgebung. Für die beiden Kohlenstoffatome C(2) und C(3) der zwei kubischen Doppellagen gilt Äquivalentes.

Aus den $\Delta l_{6H}(i;j)/l_0^{6H}$ Werten ergibt sich, dass $l_{6H}(3) > l_{6H}(2) > l_{6H}(1)$ gilt, d.h. die Bindung zwischen dem Atom C(3) und Si(1'), also dem Übergang von der kubischen zur hexagonalen Doppellage ist länger als diejenige, die die zwei kubischen Lagen verbindet und diese ist wiederum länger als die Bindung zwischen C(1) und Si(2), also dem Übergang von der hexagonalen zur kubischen Doppellage.

7.3 Modell eines modularen Aufbaus

Die im vorherigen Abschnitt diskutierenden Relaxationsparameter, die aus der Analyse von „fastverbotenen“ Reflexen gewonnen wurden, lassen nur Aussagen relativ zur Gitterkonstanten c_{nH} zu. Durch die Verknüpfung dieser Relaxationsparameter mit den Gitterparameter aus Tab. 7.1 lassen sich absolute Größen in den Elementarzellen von $4H$ - und $6H$ -SiC bestimmen und auf Gemeinsamkeiten hin zu untersuchen.

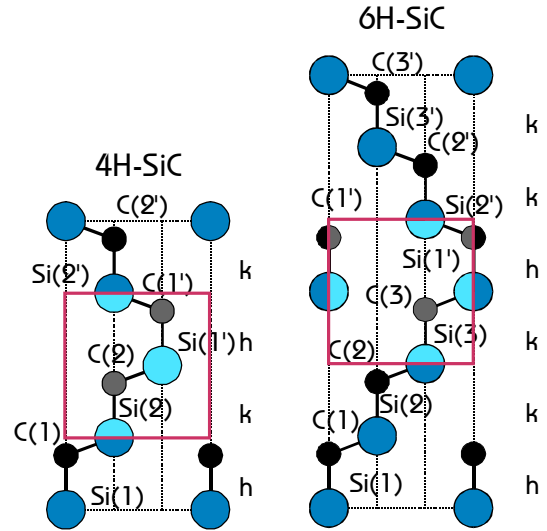
In Tab. 7.7 sind die aus den Gitterparametern aus Tab. 7.1 und den Relaxationsparametern aus Tab. 7.5 und Tab. 7.6 berechneten Dicken der Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen bezogen auf die Siliziumatome $d_{nH}^{\text{Si}}(j)$ bzw. Kohlenstoffatome $d_{nH}^{\text{C}}(j)$ für 4H- und 6H-SiC gezeigt. Bezüglich ihrer atomaren Umgebung sind vergleichbare Parameter, d.h. die atomaren Umgebungen gleichen sich mindestens bis zum übernächsten Nachbaratom (Abb. 7.5), der beiden Polytypen: $d_{4H}^{\text{Si}}(1)$ und $d_{6H}^{\text{Si}}(1)$, sowie $d_{4H}^{\text{Si}}(2)$ und $d_{6H}^{\text{Si}}(3)$. Bezogen auf die Kohlenstoffatome können bezüglich ihrer atomaren Umgebung die Parameter $d_{4H}^{\text{C}}(1)$ mit $d_{6H}^{\text{C}}(1)$ und $d_{4H}^{\text{C}}(2)$ mit $d_{6H}^{\text{C}}(3)$ verglichen werden.

Der Vergleich dieser Werte führt zu dem Ergebnis, dass sich die Dicken der Doppellagen, sowohl für die experimentell ermittelten Werte als auch für die zwei *ab-initio* Modelle, innerhalb eines Polytyps mehr unterscheiden als bei Doppellagendicken in vergleichbaren atomaren Umgebungen zwischen den zwei Polytypen, z.B. beträgt die Dickendifferenz bei den im Rahmen dieser Arbeit bestimmten Parameter zwischen $d_{6H}^{\text{Si}}(2)$ und $d_{6H}^{\text{Si}}(3)$ mehr als 0.1 %, während sich $d_{4H}^{\text{Si}}(2)$ und $d_{6H}^{\text{Si}}(3)$ nur um 0.005 % unterscheiden. Daraus kann man folgern, dass Doppellagendicken in äquivalenten atomaren Umgebungen dieser zwei Polytypen ähnlich sind, und die Vermutung anstellen, dass man Elementarzellen von SiC-Polytypen modular aus Segmenten der Elementarzelle anderer Polytypen aufbauen kann. Dies bedeutet, dass der Einfluss von dritten und weiter entfernten Nachbarnatomen keine oder nur eine sehr geringe Rolle beim Aufbau der Elementarzellen spielt.

Tab. 7.7: Dicken von Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen berechnet aus den Gitterparametern aus Tab. 7.1 und den Relaxationsparametern aus Tab. 7.5 und Tab. 7.6

		diese Arbeit [nm]	CHENG [nm]	KÄCKELL [nm]
4H	$d_{4H}^{\text{Si}}(1)$	0.252067	0.252019	0.251908
	$d_{4H}^{\text{Si}}(2)$	0.252173	0.252221	0.252332
	$d_{4H}^{\text{C}}(1)$	0.251244	0.251414	0.251404
	$d_{4H}^{\text{C}}(2)$	0.252996	0.252826	0.252836
6H	$d_{6H}^{\text{Si}}(1)$	0.252122	0.252056	0.252041
	$d_{6H}^{\text{Si}}(2)$	0.251687	0.251724	0.251769
	$d_{6H}^{\text{Si}}(3)$	0.252179	0.252208	0.252177
	$d_{6H}^{\text{C}}(1)$	0.251498	0.251497	0.251527
	$d_{6H}^{\text{C}}(2)$	0.251699	0.251724	0.251769
	$d_{6H}^{\text{C}}(3)$	0.252792	0.252767	0.252692

Abb. 7.6: Elementarzellen von 4H- und 6H-SiC. Die rot eingerahmten Bereiche kennzeichnen vergleichbare Segmente der beiden Elementarzellen. *k* bzw. *h* bezeichnen die kubische bzw. hexagonale Umgebung einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage



Betrachtet man die Elementarzellen von 4H- und 6H-SiC (Abb. 7.6), kann man erkennen, dass das Segment der 6H-SiC Elementarzelle zwischen den Atomen Si(3) und Si(2') mit dem 4H-SiC Segment zwischen den Atomen Si(2) und Si(2') bezüglich ihrer atomaren Umgebung äquivalent ist. Die 4H-SiC *c*-Gitterkonstante lässt sich nach dieser Modellvorstellung aus 6H-SiC Parametern berechnen, wobei wieder die Äquivalenz der zwei Hälften der Elementarzelle zu berücksichtigen ist^a

$$(c_{4H})_{\text{mo}} = 2(d_{6H}^{\text{Si}}(1) + d_{6H}^{\text{Si}}(3)) \quad (7.13)$$

In Tab. 7.8 ist die nach (7.13) berechnete Gitterkonstante, sowie deren Abweichung von der nach der BOND-Methode bestimmten c_{4H} aus Tab. 7.1 aufgeführt. In Abb. 7.8 sind die nach (7.13) berechneten $\frac{(c_{4H})_{\text{mo}}}{4}$, die aus Tab. 7.1 entnommenen $\frac{c}{n}$ -Gitterparameter, sowie die Regressionsgerade nach (7.2) aufgetragen. Hier wird graphisch die Gültigkeit des modularen Modells verdeutlicht. Die $\frac{(c_{4H})_{\text{mo}}}{4}$ -Werte liegen nahe der Regressionsgeraden, d.h. sie können eindeutig dem Polytyp 4H-SiC zugeordnet werden. Aus Abb. 7.8 wird ebenfalls deutlich, dass die beiden *ab-initio* Modelle mehr die Annahme eines modularen Aufbaus stützen als das experimentelle. Werden statt der Siliziumparameter $d_{nH}^{\text{Si}}(j)$ diejenigen von Kohlenstoff $d_{nH}^{\text{C}}(j)$ verwendet, ändern sich die in Tab. 7.8 dargestellten Werte für die *ab-initio* Werte nicht, da die zwei Silizium-Kohlenstoff-Bindungslängen in den kubischen Doppellagen gleich lang sind ($\Delta L_{6H}(2;3)/L_0^{6H} = 0$) und für das experimentelle nur sehr schwach, da $\Delta L_{6H}(2;3)/L_0^{6H}$ klein ist.

^a Mit dieser Annahme ließe sich auch das Problem der Mehrdeutigkeiten aus dem letzten Kapitel lösen. Für das Modell +1_{6H} ergibt sich aus (7.13) $(c_{4H})_{\text{mod}} = 1.0086$ nm. Für das Modell -1_{6H} (Vorzeichenumkehr von $\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(j)/d_0^{6H}$) ist $d_{6H}^{\text{Si}}(1) = 0.25187$ nm und $d_{6H}^{\text{Si}}(3) = 0.251813$ nm. Daraus ergibt sich $(c_{4H})_{\text{mod}} = 1.00737$ nm. Die Abweichung von dem experimentellen Wert des Gitterparameters c_{4H} (Tab. 7.1) beträgt für das Modell +1_{6H} 0.012 % und für das Modell -1_{6H} 0.11 %. Diese Abweichung ist für das Modell +1_{6H} um ca. eine Größenordnung kleiner als für -1_{6H}, so dass das Modell +1_{6H} als das wahrscheinlichere angenommen werden kann. Unter der Annahme, dass sowohl bei 6H- als auch bei 4H-SiC die Si-C-Bindungslänge in *c*-Richtung in hexagonaler Umgebung größer als in kubischer ist, kann man von 6H- auf 4H-SiC schließen und auch bei diesem Polytyp das Modell +1_{4H} als das richtige annehmen. Eine ausführliche Diskussion dazu findet sich in BAUER *et al.* (2001).

Tab. 7.8: Aus (7.13) berechnete c -Gitterkonstante von $4H$ -SiC, deren Normierung auf eine Si-C-Doppelschicht und die Abweichung von der experimentell bestimmten Gitterkonstante.

	$(c_{4H})_{mo}$ [nm]	$\frac{(c_{4H})_{mo}}{4}$ [nm]	$\frac{(c_{4H})_{mo} - c_{4H}}{4}$ [nm]	$\frac{(c_{4H})_{mo} - c_{4H}}{c_{4H}}$ [%]
diese Arbeit	1.00860	0.252150	$3.0 \cdot 10^{-5}$	0.012
CHENG	1.00853	0.252132	$1.2 \cdot 10^{-5}$	0.005
KÄCKELL	1.00844	0.252109	$1.1 \cdot 10^{-5}$	0.004

Im folgenden wird das Modell des modularen Aufbaus auf die Polytypen $15R$ - und $21R$ -SiC angewandt. Die Elementarzellen dieser Polytypen lassen sich ebenfalls aus Segmenten der Elementarzelle von $6H$ -SiC aufbauen. Abb. 7.7 zeigt jeweils ein Drittel der Elementarzelle von $15R$ - und $21R$ -SiC. Die Abfolge von kubischen und hexagonalen Doppellagen ist bei $15R$ -SiC $hkkhk$, und bei $21R$ -SiC $hkkhk$. Die $15R$ -SiC Struktur beinhaltet zwei hexagonale Doppellagen auf die jeweils anschließend eine kubische folgt, d.h. der Abstand von Atom Si(1) zu Si(2) und von Atom Si(4) zu Si(5) ist nach dem Modell des modularen Aufbaus äquivalent zu $d_{6H}^{Si}(1)$. Weiterhin existieren zwei kubische Doppellagen auf die eine hexagonale folgt, d.h. die Abstände von Atom Si(3) zu Si(4) und von Atom Si(5) zu Si(1') entsprechen $d_{6H}^{Si}(3)$. Zuletzt gibt es noch eine kubische Doppellage auf die eine weitere kubischen Doppellage folgt, d.h. der Abstand von Atom Si(2) zu Si(3) ist äquivalent zu $d_{6H}^{Si}(2)$. Damit ergibt sich für die c -Gitterkonstante für $15R$ -SiC:

$$(c_{15R})_{mo} = 3 \left(2d_{6H}^{Si}(1) + d_{6H}^{Si}(2) + 2d_{6H}^{Si}(3) \right) \quad (7.14)$$

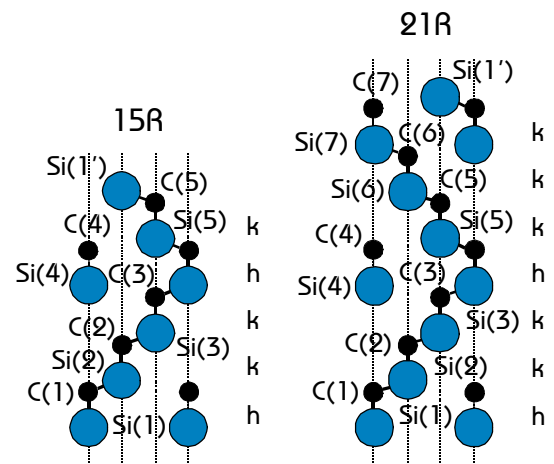


Abb. 7.7: Ausschnitt der Elementarzellen von $15R$ - und $21R$ -SiC (jeweils $\frac{1}{3}$). k bzw. h bezeichnen die kubische bzw. hexagonale Umgebung einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage.

Tab. 7.9: Berechnete c -Gitterkonstante der Polytypen 15R und 21R nach dem Modell des modularen Aufbaus, sowie die Abweichung von der gemessenen c -Gitterkonstanten aus Tab. 7.1 in %.

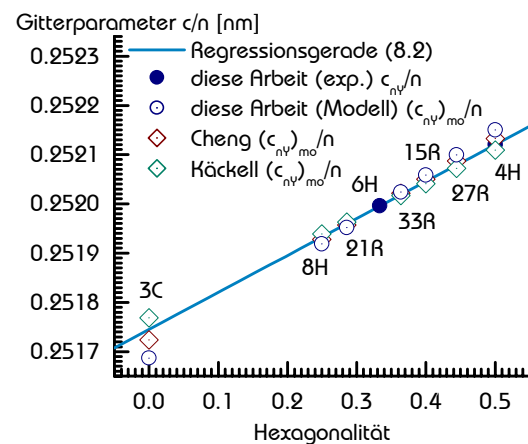
Polytyp	$\frac{(c_{nR})_{mo}}{n}$ [nm]			$\left \frac{(c_{nR})_{mo} - c_{nR}}{c_{nR}} \right $ [%]		
	diese Arbeit	CHENG	KÄCKELL	diese Arbeit	CHENG	KÄCKELL
15R	0.252058	0.252050	0.252041	0.005	0.002	0.002
21R	0.251952	0.251957	0.251963	0.003	0.001	0.002

In ähnlicher Weise lässt sich die 21R-SiC Elementarzelle aufbauen und es gilt:

$$(c_{21R})_{mo} = 3(2d_{6H}^{Si}(1) + 3d_{6H}^{Si}(2) + 2d_{6H}^{Si}(3)) \quad (7.15)$$

In Tab. 7.9 sind die nach (7.14) und (7.15) berechneten Gitterparameter gezeigt. Die Abweichungen von den gemessenen c -Gitterkonstanten liegen in der gleichen Größenordnung wie beim Polytyp 4H, so dass auch hier von der Gültigkeit des Modells des modularen Aufbaus ausgegangen werden kann. Dies wird auch durch Abb. 7.8 bestätigt. Die nach diesem Modell berechneten Gitterkonstanten von 15R- und 21R-SiC liegen nahe an der Regressionsgeraden, wobei auch hier die Werte von CHENG und KÄCKELL dem Modell eher entsprechen als die experimentellen. Als weiteres Beispiel soll noch der Polytyp 3C-SiC dienen, dessen Gitterkonstanten im Rahmen dieser Arbeit nicht vermessen wurden. 3C-SiC ist der rein kubische Polytyp, die Abfolge der Doppellagen ist $kkk\dots$. Demnach gilt für die c -Gitterkonstante dieses Polytyps in hexagonaler Notation: $(c_{3C})_{mod} = 3d_{6H}^{Si}(2)$. Die Abweichung von der durch lineare Regression (7.2) bestimmten c -Gitterkonstanten (Tab. 7.2) beträgt für diese Arbeit 0.022 %, für das Modell CHENG 0.008 % und für das Modell KÄCKELL 0.010 %. Die so berechnete c -Gitterkonstante ist in Abb. 7.8 gezeigt. In Abb. 7.8 sind auch noch die aus den 6H-SiC Segmenten berechneten und auf eine Doppellage normierten c -Gitterkonstanten der Polytypen 8H-SiC ($hkkkhkkk$), 33R-SiC ($(hkkhkkhkkhk)_3$) und 27R-SiC ($(hkhkhkhkk)_3$) gezeigt.

Abb. 7.8: Nach dem Modell des modularen Aufbaus berechnete Gitterparameter c/n , sowie die experimentell bestimmten Parameter aus Tab. 7.1 und die Regressionsgerade (7.2).



In Abb. 7.8 kann man erkennen, dass mit größerem Abstand der Hexagonalität vom Polytyp $6H\text{-SiC}$, dessen Parameter hier zum Aufbau der anderen Polytypen dienen, sich der Abstand zur Regressionsgeraden vergrößert, da sich dort der Messfehler der experimentellen bzw. die Rechenungenauigkeit der *ab-initio* Kalkulationen stärker auswirkt.

Zum modularen Aufbau können selbstverständlich auch die Dicken der Doppellagen anderer Polytypen herangezogen werden, z.B. wäre im Rahmen dieser Arbeit auch möglich die Polytypen aus folgenden drei Parametern aufzubauen: $d_{4H}^{\text{Si}}(1)$, $d_{4H}^{\text{Si}}(2)$ und $d_{6H}^{\text{Si}}(2)$.

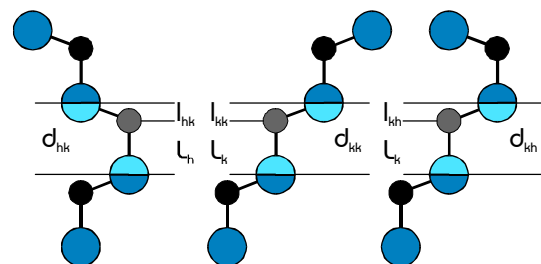
Die obigen Ergebnisse legen die Vermutung nahe, dass die Modellvorstellung eines modularen Aufbaus der Elementarzellen von Siliziumkarbid-Polytypen verallgemeinert werden kann. Demnach lassen sich alle Polytypen aus folgenden drei Grundgrößen aufbauen (Abb. 7.9):

- i. Dem Abstand d_{hk} zwischen zwei Siliziumatomen. Dieses Elementarzellensegment enthält eine Silizium-Kohlenstoff-Bindung in hexagonaler Umgebung und die Silizium-Kohlenstoff-Bindung des Übergangs von einer hexagonalen zu einer kubischen Doppellage. In der Abfolge kubischer und hexagonaler Doppellagen entspricht dies ...*hk*...
- ii. Dem Abstand d_{kk} . Diese Segment enthält eine Si-C-Bindung in kubischer Umgebung und die Bindung des Übergangs zu einer zweiten kubischen Doppellage, was einer Abfolge von ...*kk*... entspricht.
- iii. Dem Abstand d_{kh} . Diese Segment enthält eine Si-C-Bindung in kubischer Umgebung und die Bindung des Übergangs zu einer hexagonalen Doppellage, was einer Abfolge von ...*kh*... entspricht.

Werden die Kohlenstoffatome als Bezugspunkt gewählt, gilt Äquivalentes. Als einzige Ausnahme kann der rein hexagonale Polytyp $2H\text{-SiC}$ nicht aus solchen Segmenten aufgebaut werden. Die Abfolge der Doppellagen dieser Struktur ist *hhh*.... Bei keinen anderen Polytyp folgt auf eine hexagonale Doppellage eine weitere hexagonale.

Aus den experimentellen Werten, die im Rahmen dieser Arbeit bestimmt wurden, konnten zwar die oben besprochenen Dicken von Si-C-Doppellagen bestimmt werden, die einzelnen Si-C-Bindungslängen jedoch nicht. Bei den *ab-initio* Rechnungen können zwar die relativen Parameter δ_{nH} und ε_{nH} recht genau bestimmt werden, aber die absoluten Gitterparameter a_{nH} und c_{nH} nur sehr ungenau.

Abb. 7.9: Dicken von Si-C-Doppellagen und Bindungslängen in *c*-Richtung, die für das Modell des modularen Aufbaus nötig sind.



Tab. 7.10: Absolute Bindungslängen L_{nH} und l_{nH} berechnet aus den Relaxationsparametern nach CHENG und KÄCKELL und den Gitterparametern aus dieser Arbeit.

		CHENG [nm]	KÄCKELL [nm]		CHENG [nm]	KÄCKELL [nm]
4H	$L_{4H}(1)$	0.189705	0.189574	$l_{4H}(1)$	0.0623140	0.0623341
	$L_{4H}(2)$	0.189100	0.189070	$l_{4H}(2)$	0.0631208	0.0632620
6H	$L_{6H}(1)$	0.189587	0.189556	$l_{6H}(1)$	0.0624698	0.0624849
	$L_{6H}(2)$	0.189027	0.189042	$l_{6H}(2)$	0.0626966	0.0627268
	$L_{6H}(3)$	0.189027	0.189042	$l_{6H}(3)$	0.0631804	0.0631352

Um die Vorteile beider Methoden zu verbinden, werden im Folgenden die Si-C-Bindungslängen für die beiden Polytypen 4H- und 6H-SiC aus den Gitterparametern, die im Rahmen dieser Arbeit ermittelt wurden (Tab. 7.1), und den Relaxationsparametern der Modelle CHENG und KÄCKELL aus Tab. 3.1 berechnet. Die Längen der Si-C-Bindungen in c -Richtung $L_{nH}(j)$ sowie die Projektion der Bindungslängen auf die [0001]-Richtung $l_{nH}(j)$ vom j -ten Kohlenstoffatom bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom (Abb. 7.5) sind in Tab. 7.10 gezeigt.

Auch bei der Betrachtung der Bindungslängen ergibt sich, wie schon bei den Dicken der Si-C-Doppellagen, dass sich die Bindungslängen $L_{nH}(j)$ und $l_{nH}(j)$ innerhalb der Polytypen mehr unterscheiden als zwischen den zwei Polytypen, wenn vergleichbare atomare Umgebungen betrachtet werden. Vergleichbar sind: $L_{4H}(1)$ mit $L_{6H}(1)$, beides sind Bindungen in hexagonaler Umgebung, $L_{4H}(2)$ mit $L_{6H}(2)$ bzw. $L_{6H}(3)$, da dies Bindungen in kubischer Umgebung sind. $l_{4H}(1)$ und $l_{6H}(1)$ beinhalten den Übergang von einer hexagonalen zu einer kubischen, $l_{4H}(2)$ und $l_{6H}(3)$ den Übergang von einer kubischen zu einer hexagonalen Doppellage.

Unter der Annahme, dass die Parameter $L_{nY}(j)$ und $l_{nY}(j)$ in allen Polytypen in vergleichbaren atomaren Umgebungen die gleiche Länge haben, lässt sich das obige Modell des modularen Aufbaus aller Siliziumkarbid-Polytypen noch verfeinern. Alle Polytypen lassen sich demnach aus sechs verschiedene Bindungslängen (Abb. 7.9) aufbauen:

- Die Bindungslänge parallel zur c -Achse innerhalb einer hexagonalen Doppellage, im Folgenden als L_h bezeichnet.
- Die Bindungslänge L_k parallel zur c -Achse innerhalb einer kubischen Doppellage.
- Die auf die [0001]-Richtung projizierte Bindungslänge l_{hk} beim Übergang von einer hexagonalen in eine kubische Doppellage.
- Die auf die [0001]-Richtung projizierte Bindungslänge l_{kh} beim Übergang von einer kubischen in eine hexagonale Doppellage.
- Die auf die [0001]-Richtung projizierte Bindungslänge l_{kk} beim Übergang von einer kubischen in eine andere kubische Doppellage.

- vi. Die auf die [0001]-Richtung projizierte Bindungslänge l_{hh} beim Übergang von einer hexagonalen in eine andere hexagonale Doppellage. Dieser Übergang tritt nur in dem Polytyp $2H$ -SiC auf.

Sind diese Parameter bekannt können daraus alle Bindungslängen und damit die Relaxationsparameter δ_{nY} und ε_{nY} für alle Polytypen berechnet werden. Tab. 7.11 zeigt δ_{nY} und ε_{nY} für $15R$ - und $21R$ -SiC. Die Stapelfolge wurde gemäß Abb. 7.7 gewählt. Zur Berechnung dieser Werte wurden die Bindungslängen von $6H$ -SiC aus Tab. 7.10 verwendet, da bei diesem Polytyp alle zum Aufbau der $15R$ - und $21R$ -Elementarzelle benötigten Bindungslängen (i. – v.) vorhanden sind. Im einzelnen gilt: $L_h = L_{6H}(1)$, $L_k = L_{6H}(2)$, $l_{hk} = l_{6H}(1)$, $l_{kk} = l_{6H}(2)$ und $l_{kh} = l_{6H}(3)$. Für $15R$ -SiC liegen Werte aus *ab-initio* Rechnungen von CHENG vor. Ein Vergleich mit diesen zeigt nur eine geringe Abweichung, die innerhalb der Genauigkeit der *ab-initio* Rechnungen liegt. Dies bestätigt wiederum die Annahme des Modells eines modularen Aufbaus.

In der obigen Betrachtung zum modularen Aufbau der Elementarzellen von Siliziumkarbidpolytypen wurde nur Längen entlang der c -Achse berücksichtigt. Ein Einfluss der unterschiedlichen a -Gitterkonstanten der einzelnen Polytypen konnte im Rahmen der Messgenauigkeit bzw. der Genauigkeit der *ab-initio* Rechnungen nicht nachgewiesen werden.

Tab. 7.11: Relaxationsparameter δ_{nY} und ε_{nY} von $15R$ - und $21R$ -SiC, die aus den $6H$ -SiC Parametern aus Tab. 7.10 berechnet wurden. Bei $15R$ -SiC sind die aus *ab-initio* berechneten Parameter (Tab. 3.1) in Klammern angegeben.

Polytyp	j	$\delta_{nY}(j) \cdot 10^4$ (Si)		$\varepsilon_{nY}(j) \cdot 10^4$ (C)	
		CHENG	KÄCKELL	CHENG	KÄCKELL
15R	1	0 (0)	0	1.5 (1.8)	1.4
	2	0.0 (0.3)	0.0	0.0 (0.3)	0.0
	3	-0.8 (-0.5)	-0.7	-0.8 (-0.6)	-0.7
	4	-0.4 (-0.1)	-0.4	1.1 (1.4)	1.0
	5	-0.4 (-0.4)	-0.4	-0.4 (-0.3)	-0.3
21R	1	0	0	1.2	1.1
	2	0.2	0.2	0.3	0.3
	3	-0.3	-0.2	-0.2	-0.3
	4	0.2	0.2	1.4	1.3
	5	0.4	0.4	0.5	0.5
	6	-0.1	0.0	0.1	0.1
	7	-0.5	-0.4	-0.4	-0.2

8 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Strukturverfeinerung von Siliziumkarbid-Polytypen durchgeführt und durch die Verbindung von absolut gemessenen Gitterparametern mit zellinternen Verfeinerungsparametern, die aus der Messung von „fastverbotenen“ Reflexen gewonnen wurden, ein Modell eines modularen Aufbaus der Siliziumkarbidstruktur entworfen. Damit leistet diese Arbeit einen Beitrag zur Problematik der Polytypie bei Siliziumkarbid.

Zur Gewinnung der Gitterparameter a_{nY} und c_{nY} wurden hochpräzise Messungen nach der BOND-Methode durchgeführt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Polytypen 15R- und 21R-SiC vermessen. In Verbindung mit den Gitterparametern von 4H- und 6H-SiC, die schon vor Beginn dieser Arbeit am Institut für Optik und Quantenelektronik vermessen wurden, ergab sich ein linearer Verlauf der beiden Gitterparameter a_{nY} und c_{nY} in Abhängigkeit von der Hexagonalität. a_{nY} zeigt ein fallendes, c_{nY} ein ansteigendes Verhalten mit zunehmender Hexagonalität. Aus den so gewonnenen Regressionsgeraden lassen sich die Gitterparameter a_{nY} und c_{nY} für alle weiteren Polytypen bestimmen.

Die zellinternen Verfeinerungsparameter wurden für die Polytypen 4H- und 6H-SiC nach der Methode der „fastverbotenen“ Reflexe bestimmt. Dazu wurden Messungen von Integralintensitäten der sehr schwachen „fastverbotenen“ Reflexe durchgeführt und aus diesen Absolutbeträge von Strukturfaktoren bestimmt. Daraus lassen sich durch Auswertung eines Gleichungssystems Relaxationsparameter, wie u.a. Abweichungen von den idealen Silizium-Kohlenstoff-Doppellagendicken bestimmen. Die aufgrund fehlender Phaseninformationen bei dieser Methode entstandenen Mehrdeutigkeiten konnten durch den Vergleich von gemessenen Mehrstrahlprofilen mit nach der Theorie von SHEN berechneten beseitigt werden. Ein Vergleich mit aus *ab-initio* Rechnungen von KÄCKELL *et al.* und CHENG *et al.* gewonnenen Relaxationsparametern zeigte eine gute Übereinstimmung.

Durch die Kombination der beiden obigen Resultate konnten absolute zellinterne Strukturgrößen bestimmt werden. Dabei zeigte sich, dass Strukturgrößen in äquivalenten, d.h. bis zum zweiten Nachbaratom identischen, atomaren Umgebungen vergleichbare Größen besitzen. Daraus folgt, dass die Strukturen aller Polytypen Segmente von anderen Polytypen enthalten, z.B. können aus den Dicken der Silizium-Kohlenstoff Doppellagen des Polytyps 6H-SiC, die

in drei unterschiedlichen atomaren Umgebungen vorliegen, die Elementarzellen aller anderen Polytypen aufgebaut werden.

Da mit den aus der Methode der „fastverbotenen“ Reflexe gewonnenen Relaxationsparameter nur die Silizium- bzw. die Kohlenstoffteilzelle vollständig beschrieben werden kann, nicht jedoch die absoluten Bindungslängen zwischen den Silizium- und Kohlenstoffatomen, wurden diese aus den Relaxationsparametern von KÄCKELL *et al.* bzw. CHENG *et al.* und experimentell bestimmten Gitterkonstanten für die Polytypen 4H- und 6H-SiC berechnet. Auch hier zeigte sich, dass Bindungslängen entlang der *c*-Achse bzw. Projektionslängen von Bindungen auf die *c*-Achse, in äquivalenten atomaren Umgebungen vergleichbare Längen besitzen.

Das Modell eines modularen Aufbaus kann im Rahmen der Messgenauigkeit, bzw. der Rechengenauigkeit, sowohl durch die experimentellen Werte, als auch durch die *ab-initio* Rechnungen von KÄCKELL *et al.* und CHENG *et al.* bestätigt werden.

Literatur

ACHESON E. G.: Engl. Patent 17911, (1892).

ADAMSKI R. F. & MERZ K. M.: “Synthesis and crystallography of the wurzite form of silicon carbide”, *Z. Kristallogr.*, **111**, (1959), 350–361.

AUGUSTINE G., HOBGOOD H. MCD, BALAKRISHNA V., DUNNE G., HOPKINS R. H., *phys. stat. sol. (b)*, **202**, (1997), 137–148.

AUTHIER A.: “Dynamical Theory of X-Ray Diffraction”, Oxford Science Publications, (2001).

BARTELS W. J.: “Characterization of thin layers on perfect crystals with a multipurpose high resolution x-ray diffractometer”, *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, (1983), 338–345.

BAUER A.: „Flüssigphasenepitaxie von 6H-SiC-Schichten und deren Charakterisierung“, Diplomarbeit, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, (1995).

BAUER A., KRÄUSSLICH J., DRESSLER L., KUSCHNERUS P., WOLF J., GOETZ K., KÄCKELL P., FURTHMÜLLER J. & BECHSTEDT F.: “High-precision determination of atomic positions in crystals: The case of 6H- and 4H-SiC”, *Phys. Rev. B* **57**, (1998), 2647–2650.

BAUER A., KRÄUSSLICH J., KUSCHNERUS P., GOETZ K., KÄCKELL P. & BECHSTEDT F.: “High-precision determination of atomic positions in 4H- and 6H-SiC crystals”, *Materials Science and Engineering B* **61-62**, (1999), 217–220.

BAUER A., REISCHAUER PH., KRÄUSSLICH J., SCHELL N., MATZ W. & GOETZ K.: “Structure refinement of the silicon carbide polytypes 4H and 6H: unambiguous determination of the refinement parameters”, *Acta. Cryst. A* **57**, (2001), 60–67.

BAUMHAUER H.: „Über die Kristalle des Carborundums“, *Zeitschrift für Kristallographie*, **50**, (1912), 33–39.

BAUMHAUER H.: „Über die verschiedenen Modifikationen des Carborundums und die Erscheinung der Polytypie“, *Zeitschrift für Kristallographie*, **55**, (1915), 249–259.

- BRAM A.:** „Untersuchungen zur Bestimmung der Elektronendichteverteilung in Siliciumcarbid“, Diplomarbeit, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, (1990).
- BERCELIUS J. J.,** *Ann. Phys. Chemie*, Leipzig, (1824), 169–230.
- BOEHM J. VON & BAK. P.:** “Devil’s Stairs and the Commensurate-Commensurate Transitions in CeSb”, *Phys. Rev. Lett.* **42**, (1979), 122–125.
- BOND W. L.:** “Precision lattice constant determination”, *Acta. Cryst* **13**, (1960), 814–817.
- BHATNAGER M. & BALIGA B. J.:** “Comparison of 6H-SiC, 3C-SiC, and Si for Power Devices”, *IEEE Trans Electron Devices*, **ED-40**, (1993), 645–655.
- BRANDER R. W. & SUTTON R. P.:** “Solution grown p-n junctions”, *Brit. J. Appl. Phys. (J. Phys. D)*, Ser. 2, Vol. **2**, (1969), 309–318.
- BRAGG W. L.,** *Proc. Comb. Phil. Soc.* **17**, (1913), 47.
- CHANG S.-L.:** “Multiple Diffraction of X-Rays in Crystals”, Springer Verlag, Heidelberg (1984).
- CHANG. S.-L. & TANG M.-T.:** “Quantitative Determination of Phases of X-ray Reflections from Three-Beam Diffraction. I. Theoretical Considerations, *Acta. Cryst. A* **44**, (1988), 1065–1072.
- CHENG C., NEEDS R. J. & HEINE V.:** “Inter-layer interactions and the origin of SiC polytypes”, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**, (1988), 1049–1063.
- CHENG C., HEINE V. & NEEDS R. J.:** “Atomic relaxation in silicon carbide polytypes”, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, (1990), 5115–5134.
- CLEMEN L. L., CHOYKE W. J., DEVATY R. P., POWELL J. A. & KONG H. S.:** “Comparison of Dilutely Doped p-Type 6H-SiC”, in: Amorphous and Crystalline Silicon Carbide IV, Springer Proceedings in Physics Vol. **71**, Berlin, (1992), 105–115.
- COLE H., CHAMBERS F. W. & DUNN H. M.:** “Simultaneous Diffraction: Indexing Umweganregung Peaks in Simple Cases”, *Acta. Cryst.* **15**, (1962), 138–144.
- COLELLA R.:** “Multiple diffraction of X-rays and the phase problem”, in: P. P. EWALD and his Dynamical Theory of X-ray Diffraction, International Union of Crystallography, Oxford University Press, (1992), 71–78.
- COLELLA R.:** “Enantiomorphism and Multiple-Beam X-ray Diffraction. Revised”, *Acta. Cryst. A* **51**, (1995), 438–440.
- EWALD P. P.:** “Fifty years of X-ray diffraction”, International Union of Crystallography, (1962).

- FISSEL A., KAISER U., KRÄUSSLICH J., PFENNIGHAUS K., SCHRÖTER B., SCHULZ J. & RICHTER W.: "Epitaxial growth of SiC-heterostructures on α -SiC(0001) by solid source MBE", *Materials Science and Engineering B* **61-62**, (1999) 139–142.
- FISSEL A., KAISER U., SCHRÖTER B., KRÄUSSLICH J., HOBERT H. & RICHTER W.: "Molecular Beam Epitaxial Growth of Heteropolytypic and Low-Dimensional Structures of SiC", *Materials Science Forum*, **338-342**, (2000), 205–208.
- FRANK F. C., *Discuss. Farad. Soc.*, **5**, (1949), 48–54.
- FRANK F. C.: "The growth of carborundum; dislocations and polytypism", *Phil. Mag*, **42**, (1951), 1014–1021.
- GOL'DSHMIDT R.; TAIROV Y. M., TSVETKOV V. F. & CHERNOV M. A.: "Relationship between lattice parameters and degree of hexagonality in SiC polytypes", *Sov. Phys. Crystallogr.*, **27**(3), 1982, 371–372.
- GOMES DE MESQUITA A. H.: "Refinement of the Crystal Structure of SiC Type 6H", *Acta. Cryst.* **23**, (1967), 610–617.
- GROSWIG ST.: „Entwicklung, Aufbau und Erprobung eines Verfahrens zur Absolutmessung geometrischer Gitterparameter von Einkristallen mit hoher Präzision“, Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, (1984).
- HÄGG G.: "Some notes on MX₂ layer lattices with close-packed X atoms", *Arkiv. För. Kemi, Mineralogi Och Geologi*, **16B**, (1943), 1–6.
- HARRIS G. L.: "Properties of Silicon Carbide", Inspec, London (1995).
- HEYROTH F.: „Röntgentopographischer Kontrast im Dreistrahl der Interferenz“, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, (2000).
- HEYROTH F., ZELLNER J., HÖCHE H.-R., EISENSCHMIDT C., WECKERT E. & DRAKOPOULOS M.: "Pinhole topography in the three-beam case of x-ray diffraction – experiment and theory", *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, (2001), A151–A157.
- HÖLZER G., WEHRHAHN O., FÖRSTER E.: "Characterization of Flat and Bent Crystals for X-ray Spectroscopy and Imaging", *Cryst. Res. Technol.* **33**, (1998), 555–567.
- HULL A. W.: "The crystal structure of carborundum" in: "Proceedings of the American Physical Society", *Phys. Rev.*, **13**, (1919), 292–295.
- HULL A. W.: "The crystal structure of carborundum" in: "Proceedings of the American Physical Society", *Phys. Rev.*, **15**, (1920), 545–546.
- HÜMMER K. & BILLY H.: "Experimental Determination of Triplet Phases and Enantiomorphs of Non-centrosymmetric Structures. I. Theoretical Considerations", *Acta. Cryst. A* **42**, (1986), 127–133.

- HÜMMER K. & WECKERT E.: "Enantiomorphism and Three-Beam X-ray Diffraction: Determination of the Absolute Structure", *Acta. Cryst. A* **51**, (1995), 431–438.
- HÜMMER K., WECKERT E. & BONDZA H.: "Direct Determination of Triplet Phases and Enantiomorphs of Non-centrosymmetric Structures. II. Experimental Results", *Acta. Cryst. A* **45**, (1989), 182–187.
- "International Tables for Crystallography", Vol. A, 4th revised edition, Kluwer Academic Publishers, Boston (1996).
- "International Tables for Crystallography", Vol. C, 1st corrected edition, Kluwer Academic Publishers, Boston (1995).
- ISING E.: „Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus“, *Zeit. f. Physik* **31**, (1925), 253–258.
- JACKSON J. D.: „Klassische Elektrodynamik“, 2. Auflage, Walter de Gruyter, Berlin, New York, (1983).
- JAGODZINSKI H.: „Eindimensionale Fehlordnung in Kristallen und ihr Einfluss auf die Röntgeninterferenzen. I. Berechnung des Fehlordnungsgrades aus den Röntgenintensitäten“, *Acta. Cryst.*, **2**, (1949), 201–207.
- JAGODZINSKI H.: „Wachstums- bzw. Umwandlungspolytypie beim SiC und ZnS“, *Neues Jahrb. Mineral. Monatsh.*, **10**, (1954), 209–225.
- JAGODZINSKI H.: „Der Symmetrieeinfluss auf den allgemeinen Lösungsansatz eindimensionaler Fehlordnungsprobleme“, *Acta. Cryst.*, **7**, (1954a), 17–25.
- JAMES R. W.: "The optical principles of the diffraction of x-rays", Ox Bow Press, Woodbridge, Connecticut, (1982).
- JEPPS N. W. & PAGE T. F.: "Polytypic transformations in silicon carbide", *Prog. Cryst. Growth Charact.* **7** (1983), 259.
- KÄCKELL P., WENZIEN B. & BECHSTEDT F.: "Influence of atomic relaxation on the structural properties of SiC Polytypes from *ab initio* calculations", *Phys. Rev. B* **50**, (1994), 17037–17046.
- KÄCKELL P., WENZIEN B. & BECHSTEDT F.: "Electronic properties of cubic and hexagonal SiC Polytypes from *ab initio* calculations", *Phys. Rev. B* **50**, (1994a), 10761–10768.
- KÄCKELL P.: „Siliziumkarbid – Strukturelle und elektronische Eigenschaften verschiedener Polytypen“, Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, (1996).
- KARMANN ST.: „Über die homoepitaktische Abscheidung einkristalliner Siliziumkarbid-Schichten aus der Gasphase“ Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, (1992).
- KERN E. L., HAMILL D. W., DEEM, H. W. & SHEETS H. D., *Mater. Res. Bull.*, **4**, (1969), 25.

- KORDINA O., HALLIN C., HENRY A., BERGMAN J. P., IVANOV I., ELLISON A., SON N.T. & JANZÉN E.:** "Growth of SiC by 'Hot-Wall' CVD and HTCVD", *phys. stat. sol. (b)*, **202**, (1997), 321–334.
- KRÄUBLICH J., BAUER A., WUNDERLICH B. & GOETZ K.:** "Lattice Parameter Measurements of 3C-SiC Thin Films Grown on 6H-SiC(0001) Substrate Crystals", *Mat. Science. Forum*, **353–356** (2001), 319–322.
- KÜRZINGER W.:** „Herstellung blauleuchtender SiC-Lumineszenzdiode mittels Flüssigphasenepitaxie“, Dissertation, TU-Hannover, (1977).
- KUSCHNERUS P.:** „Röntgendiffraktometrische Untersuchungen zu Realstruktur und Gitterrelaxationen von Siliziumkarbid“, Diplomarbeit, Friedrich-Schiller-Universität Jena, (1996).
- LAMBRECHT W. R. L. & SEGALL B.:** "Band-Structure analysis of the conduction-band mass anisotropy in 6H and 4H SiC", *Phys. Rev. B* **52**, (1995), R2249–R2252.
- "Landolt Börnstein – Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology", New Series, Group III: Crystal and Solid State Physics, Vol. 17: Semiconductors, edited by O. MADELUNG, M. SCHULZ & H. WEISS, Subvolume a: Physics of Group IV Elements and III-V Compounds, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1982.
- LAUE, M. v.:** „Röntgenstrahlinterferenzen“, 3. Aufl., Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main, (1960).
- LELY J. A.:** „Darstellung von Einkristallen von Silizium Carbide und Beherrschung von Art und Menge der eingebauten Verunreinigungen“, *Ber. Dt. Keram. Ges.*, **32**, (1955), 299.
- LIMPIJUMNONG S. & LAMBRECHT W. R. L.:** "Total energy differences between SiC polytypes revisited", *Phys. rev. B* **57**, (1998), 12017–12022.
- LIPSCOMB, W. N.:** "Relative phases of diffraction maxima by multiple reflection.", *Acta. Cryst.* **2**, (1949), 193-194.
- MATZ W., SCHELL N., BERNHARD G., PROKERT F., REICH T., CLAUSSNER J., OEHME W., SCHLENK R., DIENEL S., FUNKE H., EICHORN F., BETZL M., PRÖHL D., STRAUCH U., HÜTTIG G., KRUG H., NEUMANN W., BRENDLER V., REICHEL P., DENEKE M. A. & NITSCHKE H.:** "ROBL – a CGR beamline for radiochemistry and material research at the ESRF", *Journal of Synchrotron Radiation*, **6**, (1999), 1076-1085.
- MITCHELL R. S.:** "A Correlation between Theoretical Screw Dislocations and the Known Polytypes of Silicon Carbide" *Z. Krist.*, **109**, (1957), 1–28.
- MOISSAN H.:** *Comptes Rendus Hebdomadaire*, Vol. CXL, (1905), 405–406.

- MÖLLER M. O.:** “Apparatus Function of a Five-Crystal X-ray Diffractometer with a Four-Reflection Monochromator”, *J. Appl. Cryst.*, **27**, (1994), 369–378.
- MORKOÇ H., STRITE S., GAO G. B., LIN M. E., SVERDLOV B., BURNS M.:** “Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies”, *J. Appl. Phys.* **76**, (1994), 1363–1398.
- OTT H.:** „Die Gitterstruktur des Karburunds (SiC). I.“, *Z. Krist.*, **61**, (1925), 505–513.
- OTT H.:** „Das Gitter des Karburunds (SiC). II.“, *Z. Krist.*, **62**, (1925a), 201–217.
- PANDEY D. & KRISHNA P.:** “A model for the growth of anomalous polytype structures in vapour grown SiC”, *J. Cryst. Growth*, **31**, (1975), 66–71.
- PANDEY D. & KRISHNA P.,** *Advances in Crystallography*, Oxford and IBH, New Delhi, (1978).
- PANDEY D. & KRISHNA P.:** “The origin of polytype structures”, *Prog. Cryst. Growth Character.*, **7**, (1983), 213.
- PARK C. H., BYOUNG-HO CH., KEUN-HO L. & CHANG K. J.:** “Structural and electronic properties of cubic, $2H$, $4H$, and $6H$ SiC”, *Phys. Rev. B* **49**, (1994), 4485–4493.
- PENSL G. & HELBIG R.:** “Silicon Carbide (SiC) - Recent Results in Physics and in Technology”, in: *Festkörperprobleme / Advances in Solid State Physics*, Vol **30**, ed by U. RÖSSLER Vieweg, Braunschweig (1990), 133–156.
- PINSKER Z. G.:** “Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals”, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, (1978).
- PRICE G. D. & YEOMAS J. M.:** “The application of the ANNNI model to polytypic behaviour.” *Acta Cryst. B* **40**, (1984), 448–454.
- RAMSDELL L. S.:** “Studies on silicon carbide”, *Am. Min.* **32**, (1947), 64–82.
- REISCHAUER PH.:** „Physikalische Bestimmung von Phaseninvarianten – Beitrag zur Strukturverfeinerung von SiC“, Diplomarbeit, Friedrich-Schiller Universität Jena, (1999).
- RENNINGER, M.:** „’Umweganregung’, eine bisher unbedachte Wechselwirkungserscheinung bei Raumgitterinterferenzen“, *Zeitschrift für Physik*, **106**, (1937), 141–176.
- ROSSMANITH E.:** “Single and multiple diffraction in non-absorbing perfect crystal spheres bathed in the monochromatic parallel incident beam: The intrinsic pattern of ψ -scans calculated in the framework of the kinematical approach”, *Z. Kristallogr.* **213**, (1998), 563–568.
- ROSSMANITH E.:** “Approximate calculation of multiple-diffraction patterns based on Renninger’s ‘kinematical simplest approach’”, *J. Appl. Cryst.* **33**, (2000), 921–927.

- ROTTNER K.:** „Gasphasen-Epitaxie von Siliziumkarbid“, Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, (1994).
- ROUND H. J.,** *Electrical World (New York)*, **49**, (1907), 303.
- RUPP R., WIEDENHOFER A., FRIEDRICHS P., PETERS D., SCHÖRNER R. & STEFANI D.:** “Growth of SiC Epitaxial Layers in a Vertical Cold Wall Reactor Suited for High Voltage Applications”, *Materials Science Forum*, **264–268**, (1998), 89–96.
- SANCHEZ DEL RIO M. & DEJUS R. J.:** “XOP: Recent Developments”, *SPIE proceedings*, **3448** (1998), 340–345.
- SCHMITT J.:** „Wachstum von Siliciumkarbidschichten durch Molekularstrahlepitaxie“ Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, (1998).
- SCHNEER C. J.:** “Polymorphism in one dimension”, *Acta. Cryst.* **8**, (1955), 279–285.
- SHAFFER P. T.:** “A Review of the Structure of Silicon Carbide”, *Acta. Cryst.*, **B25**, (1969), 477–489.
- SHEN Q.:** “A new Approach to Multibeam X-ray Diffraction Using Perturbation Theory of Scattering”, *Acta. Cryst.* **A42**, (1986), 525–533.
- SHEN Q., KYCIA ST. & DOBRIANOV I.:** “Enantiomorph determination using inverse reference-beam diffraction images”, *Acta. Cryst.* **A56**, (2000), 264–267.
- SLACK G. A.:** “Thermal Conductivity of Pure and Impure Silicon, Silicon Carbide, and Diamond”, *J. Appl. Phys.*, **35** (1964), 3460–3466.
- SUZUKI A., IKEDA M., NAGAO N., MATSUNAMI H. & TANAKA T.:** “Liquid-phase epitaxial growth of 6H-SiC by the dipping technique for preparation of blue-light emitting diodes”, *J. Appl. Phys.* **47**, (1976), 4546–4550.
- SYVÄJÄRVI M., YAKIMOVA R., RADAMSON H. H., SON N. T., WAHAB Q., IVANOV I. G., JANZÉN E.:** “Liquid phase epitaxial growth of SiC”, *Journal of Crystal Growth* **197**, (1999), 147–154.
- STEIN R. A., LANIG P. & LEIBENZEDER S.,** GR88 E 1884 DE (1988).
- STOUT G. H. & JENSEN L. H.:** “X-ray structure determination”, 2nd edition, John Wiley & Sons, New York (1989).
- TAIROV Y. M. & TSVETKOV V. F.:** “Investigation of growth process of ingots of silicon carbide single crystals”, *Journal Cryst. Growth* **43**, (1978), 209–212.
- TAYLOR A. & JONES R. M.:** “Silicon Carbide – A High Temperature Semiconductor”, eds. O’CONNOR J. R & SMILTENS J., Pergamon Press, Oxford, London, New York, Paris, (1960), 147.

- TISCHLER J. Z. & BATTERMAN B. W.:** “Determination of Phase Using Multiple-Beam Effects”, *Acta. Cryst. A* **42**, (1986), 510–514.
- VERMA A. R. & KRISHNA P.:** “Polymorphism and polytypism in crystals”, J. Willey & Sons, Inc., New York-London-Sydney, (1966).
- WECKERT E. & HÜMMER K.:** “On the Quantitative Determination of Triplet Phases by X-ray Three-Beam Diffraction”, *Acta. Cryst. A* **46**, (1990), 387–393.
- WECKERT E. & HÜMMER K.:** “Multiple-Beam X-ray Diffraction for Physical Determination of Reflection Phases and its Applications”, *Acta. Cryst. A* **53**, (1997), 108–143.
- WOLF J.:** „Einkristalldiffraktometrische Messung von Gitterparametern und Röntgenemissionslinien mit hoher Genauigkeit“, Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, (1994).
- WOOLFSON M. M.:** “An Introduction to X-Ray Crystallography”, 2nd edition, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- WOOLFSON M. M. & FAN H.-F.:** “Physical and non-physical methods of solving crystal structures”, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- WYCKOFF R. W. G.,** “Crystal Structures”, Interscience Publishers, New York (1963).
- YANG X. Y., SHI G. Y., MENG X. M., HUANG H. L. & WU Y. K.:** “Identification of a new trace 114R SiC by HREM, *Acta. Cryst. B* **55**, (1999), 255–257.
- YEH C. Y., LU Z. W., FROYEN S. & ZUNGER A.:** “Zinc-blende – wurzite polytypism in semiconductors”, *phys. rev. B*, **46**, (1992), 10086–10097.
- ZACHARIASEN W. H.:** “Theory of X-Ray Diffraction in Crystals”, Dover Publications, New York, (1994).
- ZHDANOV G. S. & MINERVINA Z. V.:** “The numerical symbol of close-packing of spheres and its application in the theory of close-packings”, *Compt. Rend. Acad. Sci. URSS*, **48**, (1945), 182–184.
- ZIEGLER G.:** „Blauleuchtende Lumineszenzdioden aus Siliziumkarbid“, Bundesministerium für Forschung und Entwicklung, Forschungsbericht T 81-010, Januar 1981.
- ZIEGLER G., LANIG P., THEIS D. & WEYRICH C.:** “Single Crystal Growth of SiC Substrate Material for Blue Light Emitting Diodes”, *IEEE Trans Electron Devices*, **ED-30**, (1983), 277-281.
- ZYWIETZ A., KARCH K., BECHSTEDT F.:** “Influence of polytypism on thermal properties of silicon carbide”, *Phys. Rev. B* **54**, (1996), 1791–1798.

Eigene Veröffentlichungen

1. **BAUER A., KRÄUSSLICH J., DRESSLER L., KUSCHNERUS P., WOLF J., GOETZ K., KÄCKELL P., FURTHMÜLLER J. & BECHSTEDT F.:** “High-precision determination of atomic positions in crystals: The case of 6H- and 4H-SiC”, *Phys. Rev. B* **57**, (1998), 2647–2650.
2. **BAUER A., KRÄUSSLICH J., KÖCHER B., GOETZ K., FISSEL A. & RICHTER W.:** “X-ray investigation of MBE-grown heteroepitaxial SiC layers on 6H-SiC substrates”, *Materials Science and Engineering B* **61-62**, (1999), 179–182.
3. **BAUER A., KRÄUSSLICH J., KUSCHNERUS P., GOETZ K., KÄCKELL P. & BECHSTEDT F.:** “High-precision determination of atomic positions in 4H- and 6H-SiC crystals”, *Materials Science and Engineering B* **61-62**, (1999), 217–220.
4. **HESS G., BAUER A., KRÄUSSLICH J., FISSEL A., SCHRÖTER B., RICHTER W., SCHELL N., MATZ W. & GOETZ K.:** “Si/Ge-nanocrystals on SiC(0001)”, *Thin Solid Films*, **380**, (2000), 86–88.
5. **BAUER A., REISCHAUER PH., KRÄUSSLICH J., SCHELL N., MATZ W. & GOETZ K.:** “Structure refinement of the silicon carbide polytypes 4H and 6H: unambiguous determination of the refinement parameters”, *Acta. Cryst.* **A57**, (2001), 60–67.
6. **KRÄUSSLICH J., BAUER A., WUNDERLICH B. & GOETZ K.:** “Lattice parameter measurements of 3C-SiC thin films grown on 6H-SiC(0001) substrate crystals”, *Mater. Sci. Forum*, **353**, (2001), 319–322.

Anhang

A Grundbegriffe der Röntgenbeugung

Hier werden einige grundlegende Begriffe der Röntgenbeugung vorgestellt, die für das Verständnis dieser Arbeit von Interesse sind. Eine ausführliche Darstellung der Theorie der Röntgenstrahlinterferenzen findet sich in der entsprechenden Literatur: die dynamische Theorie z.B. in den Büchern von M. v. LAUE (LAUE (1960)), P. P. EWALD (EWALD (1962)), Z. G. PINSKER (PINSKER (1978)), A. AUTHIER (AUTHIER (2001)) und W. H. ZACHARIASEN (ZACHARIASEN (1994)) und die kinematische Theorie in dem Buch von R. W. JAMES (JAMES (1982)).

A.1 BRAGG- und LAUE-Gleichung

Die Winkelposition am Kristall gebeugter Röntgenstrahlen lässt sich mit Hilfe der BRAGG-Gleichung (BRAGG (1913)) bestimmen:

$$2d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda \quad (\text{A.1})$$

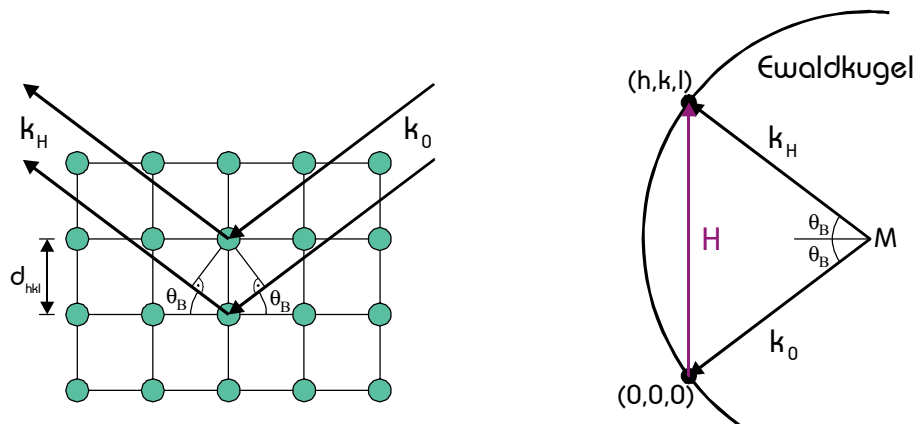


Abb A.1: Links: Darstellung der BRAGGschen Reflexionsbedingung an den Netzebenen eines Kristalls im realen Raum. Rechts: Darstellung im reziproken Raum (LAUE-Bedingung).

In (A.1) ist d_{hkl} der Netzebenenabstand mit den MILLERSchen Indizes h, k, l , λ die Wellenlänge, θ_B der BRAGG-Winkel und n eine ganze Zahl. Aufgrund der Periodizität der Kristallstruktur gibt es nur dann eine konstruktive Interferenz der Strahlen, wenn der Gangunterschied ein Vielfaches der Wellenlänge ist. In Abb. A.1 (links) ist dies an einem zweidimensionalen Gitter schematisch gezeigt. Äquivalent zur BRAGG-Gleichung im realen Raum ist die LAUE-Gleichung im reziproken Raum (Abb. A.1, rechts):

$$\mathbf{H} = \mathbf{k}_H - \mathbf{k}_0, \quad (\text{A.2})$$

wobei \mathbf{H} ein reziproker Gittervektor ist, und \mathbf{k}_0 und \mathbf{k}_H die Wellenvektoren der einfallenden bzw. der ausfallenden Welle darstellen. Zu einer konstruktiven Interferenz kann es nur kommen, wenn der Impulsübertrag $\mathbf{k}_H - \mathbf{k}_0$ einem reziproken Gittervektor entspricht, d.h. wenn, wie in Abb. A.1 abgebildet, ein reziproker Gitterpunkt auf der EWALD-Sphäre liegt. Da gilt $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}_H| = 1/\lambda$, \mathbf{k}_0 und \mathbf{k}_H den Winkel $2\theta_B$ einschließen und $|\mathbf{H}| = 1/d_{hkl}$ ist, lässt sich (A.1) in (A.2) überführen.

A.2 Strukturfaktor

Die Erfüllung der BRAGG- bzw. LAUE-Gleichung ist eine notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für das Auftreten eines Röntgenreflexes. Zusätzlich ist noch gefordert, dass der Strukturfaktor einen nicht verschwindenden Betrag hat. Der Strukturfaktor von Siliziumkarbid, der Informationen über die Verteilung der Atome innerhalb der Elementarzelle enthält, ist gegeben durch:

$$F_{\text{SiC}}(\mathbf{H}) = f_{\text{T}}^{\text{Si}}(\mathbf{H}) \sum_{j=1}^n e^{2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j} + f_{\text{T}}^{\text{C}}(\mathbf{H}) \sum_{j=1}^n e^{2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j}, \quad (\text{A.3})$$

wobei sich die Summe über die Anzahl der Atome in der Elementarzelle erstreckt. \mathbf{r}_j ist der Ortsvektor eines Atoms in der Elementarzelle. $f_T^X(\mathbf{H})$ ist der modifizierte Atomformfaktor ($X = \text{Si}, \text{C}$) unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen und der Temperaturschwingungen. $f_T^X(\mathbf{H})$ ist gegeben durch:

$$f_T^X(\mathbf{H}) = (f_0^X(\mathbf{H}) + \Delta f_X'(\lambda) + i \Delta f_X''(\lambda)) e^{-B_X \frac{\sin^2 \theta_B}{\lambda^2}} \quad (\text{A.4})$$

Der Atomformfaktor $f_0^X(\mathbf{H})$ ist ein Maß für die Streukraft der jeweiligen Atomsorte X . In diesen Wert gehen sowohl die Zahl und Verteilung der Elektronen der Atome als auch die Energie und der Streuwinkel der Strahlung ein. $\Delta f_X'(\lambda)$ und $\Delta f_X''(\lambda)$ sind der Real- und der Imaginärteil der Dispersionskorrekturen, die darauf zurückzuführen sind, dass die Elektronen im Atom diskret gebunden sind. Diese hängen von der Wellenlänge der Strahlung ab, wobei ihr Einfluss auf den Strukturfaktor in der Umgebung von Absorptionskanten am größten ist.

$\Delta f'_x(\lambda)$ ist für die Resonanz zuständig und $\Delta f''_x(\lambda)$ berücksichtigt die Absorption der Photonen im Kristall. Der Strukturfaktor lässt sich nun folgendermaßen ausdrücken:

$$F_{\text{SiC}}(\mathbf{H}) = F'_{\text{SiC}}(\mathbf{H}) + F''_{\text{SiC}}(\mathbf{H}), \quad (\text{A.5})$$

wobei $F'_{\text{SiC}}(\mathbf{H})$ den Realteil und $F''_{\text{SiC}}(\mathbf{H})$ den Imaginärteil von (A.4) enthält.

Der lineare Absorptionskoeffizient μ_{SiC} ist mit $\Delta f''_x(\lambda)$ bzw. $F''_{\text{SiC}}(0)$ über folgende Gleichung verknüpft:

$$\mu_{\text{SiC}} = \frac{2n\lambda r_e}{V_{nY}} (\Delta f'_c(\lambda) + \Delta f''_{\text{Si}}(\lambda)) = \frac{2\lambda r_e}{V_{nY}} |F''_{\text{SiC}}(0)|, \quad (\text{A.6})$$

wobei r_e der klassische Elektronenradius, n die Stapelperiode des Polytyps nY -SiC ist und V_{nY} das Volumen der Elementarzelle dieses Polytyps. Die Exponentialfunktion in (A.4) berücksichtigt die Schwächung der gestreuten Welle durch thermische Schwingungen der Atome. B_x ist ein Maß für die mittlere Schwingungsamplitude und ist von der Temperatur und der Stärke der chemischen Bindungen abhängig. In (A.4) wird davon ausgegangen, dass jeweils alle Atome einer Sorte in der Elementarzelle die gleiche Schwingungsamplitude besitzen. Da Siliziumkarbid ein sehr starres Gitter besitzt, d.h. die DEBYE-Temperatur hoch ist (ca. 1200 K), wird auch nur ein kleiner Einfluss des Temperaturfaktors auf den Strukturfaktor von Siliziumkarbid erwartet.

A.3 Integralintensität nach der kinematischen Theorie

Zur Beschreibung der Beugung von Kristallen werden zwei Theorien verwendet, die kinematische und die dynamische Theorie. Die dynamische Theorie dient zur Berechnung von Reflexionskurven im perfekten Einkristall und berücksichtigt die Wechselwirkung zwischen einfallendem und gebeugtem Wellenfeld. Die kinematische Theorie ist eine Näherung der dynamischen Theorie und kann immer dort verwendet werden, wo Mehrfachstreuung vernachlässigt werden kann, also bei gestörten Kristallen, idealen Mosaikkristallen, stark verformten Kristallen, und, wie im Rahmen dieser Arbeit, bei sehr schwachen Reflexen.

Bei der Wechselwirkung der Röntgenstrahlung mit dem Kristall gibt es zwei wichtige charakteristische Längen: die Extinktions- und die Absorptionstiefe. Anhand deren Verhältnis zueinander, lässt sich abschätzen, in wie weit die kinematische Näherung gültig ist oder ob dynamisch gerechnet werden muss. Die Extinktionstiefe ist definiert als diejenige Tiefe im Kristall, bei der die Intensität der eingehenden Röntgenstrahlung nur durch Beugung an den Netzebenen auf $1/e$ abgefallen ist. Es gilt für ebene Kristalle:

$$t_{\text{ext}} = \frac{V_{nY} \sqrt{|\sin \omega_i \sin \omega_e|}}{2\lambda r_e |F'_{\text{SiC}}(\mathbf{H})|} \quad (\text{A.7})$$

wobei ω_i der Einfallswinkel und ω_e der Ausfallswinkel der Röntgenstrahlung zur Kristalloberfläche darstellt. Konkurrierend zur Beugung tritt eine Absorption der Photonen im Kristall auf. Die Absorptionstiefe t_{abs} definiert sich als derjenige Abstand von der Kristalloberfläche, bei dem sich die Intensität durch Absorption auf $1/e$ reduziert hat und ergibt sich geometrisch aus der Weglänge des Röntgenstrahles im Kristall:

$$t_{abs} = \frac{1}{\mu_{SiC}} \left(\frac{1}{|\sin \omega_i|} + \frac{1}{|\sin \omega_e|} \right)^{-1} \quad (\text{A.8})$$

Für symmetrische Reflexe ($\omega_i = \omega_e = \theta_B$) vereinfacht sich (A.7) mit (A.1) zu: $t_{ext} = V_{nY} / (4d_{hkl} r_e |F'_{SiC}(\mathbf{H})|)$. Die kinematische Näherung kann immer dann angewandt werden, wenn die Extinktionstiefe viel größer ist als die Absorptionstiefe ($t_{ext} \gg t_{abs}$), da dann die Schwächung des Röntgenstrahles im Kristall nur durch die Photoabsorption und nicht durch Extinktion verursacht wird.

Zur Strukturbestimmung wird der Strukturfaktor aus der Integralintensität eines Reflexes bestimmt. Die Integralintensität I_H^{na} nach der kinematische Theorie eines BRAGG-Reflexes für einen kleinen Kristall, dessen Abmessungen weit kleiner als die Extinktionstiefe sind, und bei dem die Absorption vernachlässigt werden kann, ist gegeben durch:

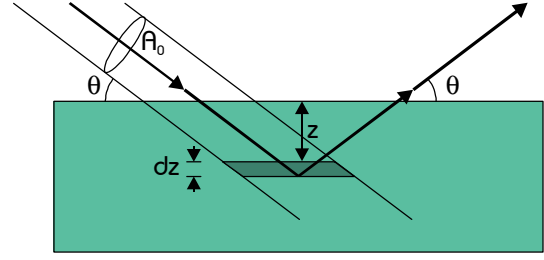
$$I_H^{na} = \Phi_0 \frac{N \lambda^3 r_e^2}{V_{nY} \sin 2\theta_B} |F_{SiC}(\mathbf{H})|^2 P, \quad (\text{A.9})$$

wobei N die Anzahl der Elementarzellen in diesem Kristall ist und Φ_0 der Photonenfluss der eingehenden Röntgenstrahlung. P ist der Polarisationsfaktor. Für normale Polarisation (σ), d.h. der Polarisationsvektor steht senkrecht zur Beugungsebene, ist $P = 1$, für parallele Polarisation (π , Polarisationsvektor in der Beugungsebene) gilt $P = |\cos 2\theta_B|$. Bei unpolarisierter Strahlung, wie sie z.B. eine Röntgenröhre oder eine Drehanode ausendet, gilt: $P = \frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta_B)$.

Betrachtet man nun einen ausgedehnten Kristall muss die Photoabsorption bei der Berechnung der Integralintensität berücksichtigt werden. Die Kristalloberfläche soll hierbei größer sein als der Fläche des unter dem Winkel θ_B auftreffenden Strahles mit der Querschnittsfläche A_0 (Abb. A.2). In dem ausgeleuchteten Volumen $(A_0/\sin\theta_B)dz$ in der Tiefe z des Kristalls befinden sich $N = A_0 dz / (\sin\theta_B V_{nY})$ Elementarzellen. Der Strahl, der in diesem Volumen gebeugt wird, durchläuft die Strecke $2z/\sin\theta_B$, bevor er den Kristall verlässt, und seine Intensität wird hierbei um $e^{-2\mu_{SiC}z/\sin\theta_B}$ geschwächt. Für die Integralintensität eines Kristalls der Dicke d ergibt sich mit (A.9):

$$I_H = \Phi_0 \frac{\lambda^3 r_e^2}{V_{nY} \sin 2\theta_B} |F_{SiC}(\mathbf{H})|^2 P \int_0^d e^{\frac{-2\mu_{SiC}z}{\sin\theta_B}} \frac{A_0}{V_{nY} \sin\theta_B} dz \quad (\text{A.10})$$

Abb. A.2.: Beugungsgeometrie an einem ebenen Kristall. A_0 ist die Querschnittsfläche des einfallenden Röntgenstrahles. Das ausgeleuchtete Volumen in der Tiefe z des Kristalls beträgt $(A_0/\sin\theta)dz$.



Wird die Integralintensität auf den auf die ankommende Intensität $\Phi_0 A_0$ normiert ergibt sich mit der Integration in (A.10):

$$\rho_H = \frac{I_H}{A_0 \Phi_0} = \frac{1 - e^{-\frac{2\mu_{\text{SiC}} d}{\sin \theta_B}}}{2\mu_{\text{SiC}}} \cdot \frac{\lambda^3 r_e^2}{V_{nY}^2 \sin 2\theta_B} |F_{\text{SiC}}(\mathbf{H})|^2 P \quad (\text{A.11})$$

Für den Idealfall des halbumendlichen Kristalls ($d \rightarrow \infty$) gilt:

$$\rho_H = \frac{\lambda^3 r_e^2}{2\mu_{\text{SiC}} V_{nY}^2 \sin 2\theta_B} |F_{\text{SiC}}(\mathbf{H})|^2 P \quad (\text{A.12})$$

Näherungsweise ist dieser Fall schon erfüllt, wenn der Kristall wenige Absorptionstiefen dick ist.

B Ausgewählte Formeln

B.1 Umrechnung zwischen dem kubischen und dem hexagonalen Kristallsystem

Fallen die kubische $[111]$ -Richtung und die hexagonale $[0001]$ -Richtung zusammen und die $[1\bar{1}0]$ -Richtung mit der $[2\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung, so gilt für die Umrechnung zwischen den MILLERschen Indizes in kubischer Notation h_{cub} , k_{cub} , l_{cub} und denen in hexagonaler Notation h_{hex} , k_{hex} , l_{hex} folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} h_{\text{hex}} &= -\frac{1}{2} h_{\text{cub}} + \frac{1}{2} k_{\text{cub}} \\ k_{\text{hex}} &= \frac{1}{2} h_{\text{cub}} - \frac{1}{2} l_{\text{cub}} \\ i_{\text{hex}} &= -\frac{1}{2} k_{\text{cub}} + \frac{1}{2} l_{\text{cub}} \\ l_{\text{hex}} &= h_{\text{cub}} + k_{\text{cub}} + l_{\text{cub}} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

bzw.:

$$\begin{aligned}
h_{\text{cub}} &= -\frac{2}{3}h_{\text{hex}} + \frac{2}{3}k_{\text{hex}} + \frac{1}{3}l_{\text{hex}} \\
k_{\text{cub}} &= \frac{4}{3}h_{\text{hex}} + \frac{2}{3}k_{\text{hex}} + \frac{1}{3}l_{\text{hex}} \\
l_{\text{cub}} &= -\frac{2}{3}h_{\text{hex}} - \frac{4}{3}k_{\text{hex}} + \frac{1}{3}l_{\text{hex}}
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Der Zusammenhang zwischen den kubischen (a_{cub}) und den hexagonalen Gitterparameter ($a_{\text{hex}}, c_{\text{hex}}$) erhält man, indem der kubische Netzebenenabstand der $(1\bar{1}0)$ -Ebene als hexagonale a -Gitterkonstante und der dreifache Netzebenenabstand der (111) -Ebene als c -Gitterkonstante definiert wird:

$$a_{\text{hex}} = \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{cub}}, \quad c_{\text{hex}} = \sqrt{3} a_{\text{cub}} \tag{B.3}$$

B.2 Netzebenenabstand hexagonal

Der Abstand d_{H} der Netzebene ($h_{\text{H}}, k_{\text{H}}, l_{\text{H}}$) ist im hexagonalen Kristallsystem gegeben durch:

$$d_{\text{H}} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h_{\text{H}}^2 + h_{\text{H}}k_{\text{H}} + k_{\text{H}}^2) + \frac{a^2}{c^2}l_{\text{H}}^2}}, \tag{B.4}$$

wobei a und c die beiden Gitterkonstanten im hexagonalen System sind.

B.3 Winkel zwischen zwei Netzebenen (hexagonal)

Seien $h_{\text{H}}, k_{\text{H}}, l_{\text{H}}$ die MILLERSchen Indizes der Netzebene **H** und $h_{\text{L}}, k_{\text{L}}, l_{\text{L}}$ die der Netzebene **L**, so ergibt sich für den Winkel α_{HL} , den die Normalen der beiden Netzebenen miteinander bilden, im hexagonalen Kristallsystem:

$$\cos(\alpha_{\text{HL}}) = \frac{h_{\text{H}}h_{\text{L}} + k_{\text{H}}k_{\text{L}} + \frac{1}{2}(h_{\text{H}}k_{\text{L}} + h_{\text{L}}k_{\text{H}}) + \frac{3a^2}{4c^2}l_{\text{H}}l_{\text{L}}}{\sqrt{\left(h_{\text{H}}^2 + k_{\text{H}}^2 + h_{\text{H}}k_{\text{H}} + \frac{3a^2}{4c^2}l_{\text{H}}^2\right)\left(h_{\text{L}}^2 + k_{\text{L}}^2 + h_{\text{L}}k_{\text{L}} + \frac{3a^2}{4c^2}l_{\text{L}}^2\right)}}, \tag{B.5}$$

wobei a und c die beteiligten hexagonalen Gitterkonstanten sind.

C Atomformfaktoren und Dispersionskorrekturen

C.1 Analytische Näherung der Atomformfaktoren

Die Atomformfaktoren für Silizium f_0^{Si} und für Kohlenstoff f_0^{C} können im Bereich von $0 \text{ \AA}^{-1} < \frac{\sin\theta}{\lambda} < 2 \text{ \AA}^{-1}$ folgendermaßen approximiert werden (Internationale Tabellen^b):

$$f_0^X\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = a_1 e^{-b_1\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_2 e^{-b_2\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_3 e^{-b_3\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_4 e^{-b_4\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + c, \tag{C.1}$$

wobei θ der BRAGG-Winkel, λ die Wellenlänge Å in sei, und X für Si oder C steht. Die Koeffizienten von (C.1) sind in Tab. C.1 für Silizium und für Kohlenstoff in Tab. C.2 aufgeführt.

Tab. C.1: Koeffizienten des Atomformfaktors für Silizium nach (C.1). b_j ist in Einheiten von Å² dargestellt.

Silizium			
a_1	5.66269	b_1	2.66520
a_2	3.07164	b_2	38.6634
a_3	2.62446	b_3	0.916946
a_4	1.39320	b_4	93.5458
c	1.24707		

Tab. C.2: Koeffizienten des Atomformfaktors für Kohlenstoff nach (C.1). b_j ist in Einheiten von Å² dargestellt.

Kohlenstoff			
a_1	2.26069	b_1	22.6907
a_2	1.56165	b_2	0.656665
a_3	1.05075	b_3	9.75618
a_4	0.839259	b_4	55.5949
c	0.286977		

C.2 Dispersionskorrekturen

Wie in Anhang A beschrieben, wird der Atomformfaktor durch die Dispersionskorrekturen $\Delta f'_X$ und $\Delta f''_X$ ergänzt:

$$f_X = f_0^X + \Delta f'_X + i\Delta f''_X \quad (\text{C.2})$$

Die Korrekturen $\Delta f'_X$ und $\Delta f''_X$ sind für die in dieser Arbeit verwendeten Röntgenenergien bzw. Wellenlängen für Silizium und Kohlenstoff in Tab. C.3 aufgeführt. Diese Daten stammen aus der Datenbank „flf2Windt.dat“ des Programms „XOP“ der ESRF.

Tab. C.3: Dispersionskorrekturen $\Delta f'_X$ und $\Delta f''_X$ ($X = \text{Si}, \text{C}$) für die in dieser Arbeit verwendeten Röntgenenergien bzw. Wellenlängen.

E [keV]	λ [nm]	$\Delta f'_{\text{Si}}$	$\Delta f''_{\text{Si}}$	$\Delta f'_{\text{C}}$	$\Delta f''_{\text{C}}$
8.03006	0.15440	0.2974	0.326331	0.01925	0.009649
8.04798	0.15405	0.2969	0.324912	0.01917	0.009600
8.05982	0.15383	0.2966	0.324013	0.01912	0.009569
17.4062	0.07123	0.0643	0.070913	0.00349	0.001619

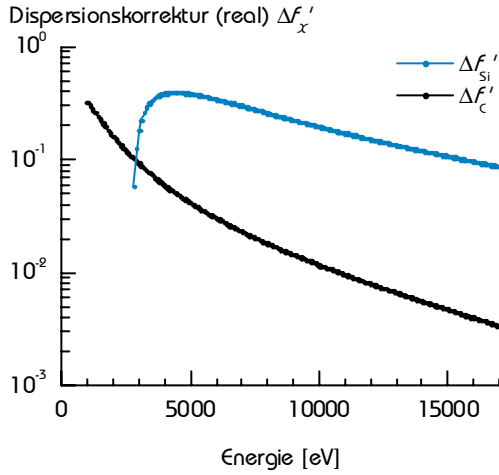


Abb. C.1: realer Anteil der Dispersionskorrektur für Silizium $\Delta f'_{\text{Si}}$ (—) und für Kohlenstoff $\Delta f'_{\text{C}}$ (—).

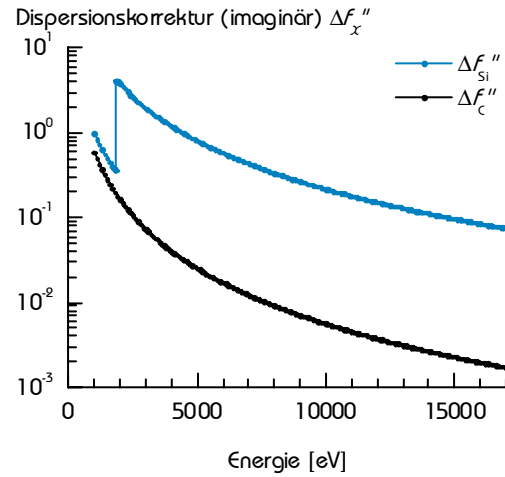


Abb. C.2: imaginärer Anteil der Dispersionskorrektur für Silizium $\Delta f''_{\text{Si}}$ (—) und für Kohlenstoff $\Delta f''_{\text{C}}$ (—).

In Abb. C.1 und Abb. C.2 ist der Verlauf von $\Delta f'_x$ und $\Delta f''_x$ in Abhängigkeit der Energie dargestellt. Aus dem Imaginärteil der Dispersionskorrekturen $\Delta f''_x$ kann nun über (A.6) der lineare Absorptionskoeffizient μ_{SiC} berechnet werden. Diese finden sich für die verwendeten Röntgenenergien in der folgenden Tabelle.

Tab. C.4: Dispersionskorrektur $\Delta f''_x$ ($X = \text{Si}, \text{C}$) und μ_{SiC} für die in dieser Arbeit verwendeten Röntgenenergien bzw. Wellenlängen.

E [keV]	λ [nm]	$\Delta f''_{\text{Si}}$	$\Delta f''_{\text{C}}$	μ_{SiC} [m^{-1}]
8.03006	0.15440	0.326331	0.009649	14110.3
8.04798	0.15405	0.324912	0.009600	14016.9
8.05982	0.15383	0.324013	0.009569	13958.0
17.4062	0.07123	0.070913	0.001619	1405.31

D Strukturfaktoren der „fastverbotenen“ Reflexe

D.1 Herleitung von (3.5) für 4H-SiC

Ausgangspunkt soll Gleichung (3.4) sein:

$$\begin{aligned}
 F_{qf}(hk.l) = & f_T^{\text{Si}}(hk.l) \left[e^{2\pi i \delta_{4H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{4} + \delta_{4H}(2) \right) l \right)} \right. \\
 & \left. + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \delta_{4H}(1) \right) l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \delta_{4H}(2) \right) l \right)} \right] \\
 & + f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[e^{2\pi i \epsilon_{4H}(1)l} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{1}{4} + \epsilon_{4H}(2) \right) l \right)} \right. \\
 & \left. + e^{2\pi i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \epsilon_{4H}(1) \right) l \right)} + e^{2\pi i \left(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k + \left(\frac{3}{4} + \epsilon_{4H}(2) \right) l \right)} \right] e^{2\pi i \frac{3}{16}l},
 \end{aligned} \tag{D.1}$$

Da für die MILLERSchen Indizes der „fastverbotenen“ Reflexe $h - k = 3r$ gilt, folgt daraus $e^{2\pi i(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k)} = 1$ und $e^{2\pi i(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k)} = 1$. Des weitem gilt, da l eine gerade natürliche Zahl sein muss, $e^{2\pi i\frac{1}{2}l} = 1$. Daraus folgt wegen der Äquivalenz der oberen mit der unteren Hälfte der Elementarzelle, dass die jeweils dritten und vierten Summanden in den Klammern identisch mit den jeweils ersten und zweiten sind, und es ergibt sich:

$$F_{qf}(hk.l) = 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) \left[e^{2\pi i\delta_{4H}(1)l} + e^{2\pi i(\frac{1}{4} + \delta_{4H}(2))l} \right] + 2f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[e^{2\pi i\epsilon_{4H}(1)l} + e^{2\pi i(\frac{1}{4} + \epsilon_{4H}(2))l} \right] e^{\frac{3}{8}\pi il} \quad (\text{D.2})$$

Die erwarteten Atomverrückungen aus der Ideallage sind im Vergleich zur c -Gitterkonstanten sehr klein. Sie liegen in der Größenordnung von 10^{-4} in Einheiten der c -Gitterkonstanten. Deshalb ist es zulässig den Strukturfaktor bis zur ersten Ordnung zu entwickeln und alle höheren Ordnungen zu vernachlässigen. Mit $e^{2\pi i\delta_{4H}(j)l} \approx 1 + 2\pi i\delta_{4H}(j)l$ und $e^{2\pi i\epsilon_{4H}(j)l} \approx 1 + 2\pi i\epsilon_{4H}(j)l$ ergibt sich demnach:

$$F_{qf}(hk.l) = 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) \left[1 + 2\pi il\delta_{4H}(1) + e^{2\pi i\frac{1}{4}l} (1 + 2\pi il\delta_{4H}(2)) \right] + 2f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[1 + 2\pi il\epsilon_{4H}(1) + e^{2\pi i\frac{1}{4}l} (1 + 2\pi il\epsilon_{4H}(2)) \right] e^{\frac{3}{8}\pi il} \quad (\text{D.3})$$

Für l gerade, aber $l \neq 4$, also $l = 2, 6, 10, 14, \dots$, folgt $e^{\frac{1}{2}\pi il} = -1$ und es gilt:

$$F_{qf}(hk.l) = 4\pi ilf_T^{\text{Si}}(hk.l) [\delta_{4H}(1) - \delta_{4H}(2)] + 4\pi ilf_T^{\text{C}}(hk.l) [\epsilon_{4H}(1) - \epsilon_{4H}(2)] e^{\frac{3}{8}\pi il} \quad (\text{D.4})$$

Gleichung (D.4) entspricht Gleichung (4.5) in Kapitel 4.

D.2 Herleitung von (3.13) und (3.20) für 6H-SiC

Ausgehend von (3.12) gilt für Typ I-Reflexe analog zu 4H-SiC $e^{2\pi i(\frac{1}{3}h + \frac{2}{3}k)} = 1$, $e^{2\pi i(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k)} = 1$ und $e^{2\pi i\frac{1}{2}l} = 1$. Der Strukturfaktor ergibt dann nach der Reihenentwicklung bis zur ersten Ordnung:

$$F_{qf}(hk.l) = 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) [(1 + 2\pi i\delta_{6H}(1)l) + e^{\frac{1}{3}\pi il} (1 + 2\pi i\delta_{6H}(2)l) + e^{\frac{2}{3}\pi il} (1 + 2\pi i\delta_{6H}(3)l)] + 2f_T^{\text{C}}(hk.l) [(1 + 2\pi i\epsilon_{6H}(1)l) + e^{\frac{1}{3}\pi il} (1 + 2\pi i\epsilon_{6H}(2)l) + e^{\frac{2}{3}\pi il} (1 + 2\pi i\epsilon_{6H}(3)l)] e^{\frac{1}{4}\pi il} \quad (\text{D.5})$$

Für alle „fastverbotenen“ Reflexe des Typ I gilt $1 + e^{\frac{1}{3}\pi il} + e^{\frac{2}{3}\pi il} = 0$. Der Strukturfaktor vereinfacht sich damit zu:

$$F_{qf}(hk.l) = 2f_T^{\text{Si}}(hk.l) \left[2\pi i \delta_{6H}(1)l + e^{\frac{1}{3}\pi i l} 2\pi i \delta_{6H}(2)l + e^{\frac{2}{3}\pi i l} 2\pi i \delta_{6H}(3)l \right] \\ + 2f_T^{\text{C}}(hk.l) \left[2\pi i \varepsilon_{6H}(1)l + e^{\frac{1}{3}\pi i l} 2\pi i \varepsilon_{6H}(2)l + e^{\frac{2}{3}\pi i l} 2\pi i \varepsilon_{6H}(3)l \right] e^{\frac{1}{4}\pi i l} \quad (\text{D.6})$$

Es gibt nun zwei Möglichkeiten. Für $l = 2, 8, 14, 20 \dots$ gilt $e^{\frac{1}{3}\pi i l} = -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3}$ und $e^{\frac{2}{3}\pi i l} = -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3}$. Für $l = 4, 10, 16, 22 \dots$ gilt $e^{\frac{1}{3}\pi i l} = -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3}$ und $e^{\frac{2}{3}\pi i l} = -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3}$. Somit ergibt sich für den Strukturfaktor für $l = 2, 8, 14, 20 \dots$:

$$F_{qf}(hk.l) = 2\pi l f_T^{\text{Si}}(hk.l) [-\sqrt{3}(\delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3)) \\ -i(\delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1))] \\ + 2\pi l f_T^{\text{C}}(hk.l) [-\sqrt{3}(\varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3)) \\ -i(\varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1))] e^{\frac{1}{4}\pi i l}, \quad (\text{D.7})$$

und für $l = 4, 10, 16, 22 \dots$:

$$F_{qf}(hk.l) = 2\pi l f_T^{\text{Si}}(hk.l) [\sqrt{3}(\delta_{6H}(2) - \delta_{6H}(3)) \\ -i(\delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1))] \\ + 2\pi l f_T^{\text{C}}(hk.l) [\sqrt{3}(\varepsilon_{6H}(2) - \varepsilon_{6H}(3)) \\ -i(\varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1))] e^{\frac{1}{4}\pi i l} \quad (\text{D.8})$$

(D.8) entspricht (3.13) in Kapitel 4. Für Typ II-Reflexe gilt $h - k \neq 3r$, d.h. $h - k = 3r + 1$ oder $h - k = 3r + 2$. Damit ergibt sich aus (3.12) für den Strukturfaktor dieser Reflexe:

$$F_{qf}(hk.l) = f_T^{\text{Si}}(hk.l) [e^{2\pi i \delta_{6H}(1)l} + (-\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{1}{6} + \delta_{6H}(2))l} \\ + (-\frac{1}{2} \mp \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{2}{6} + \delta_{6H}(3))l} \\ + e^{2\pi i (\frac{3}{6} + \delta_{6H}(1))l} + (-\frac{1}{2} \mp \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{4}{6} + \delta_{6H}(2))l} \\ + (-\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{5}{6} + \delta_{6H}(3))l}] \\ + f_T^{\text{C}}(hk.l) [e^{2\pi i \varepsilon_{6H}(1)l} + (-\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{1}{6} + \varepsilon_{6H}(2))l} \\ + (-\frac{1}{2} \mp \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{2}{6} + \varepsilon_{6H}(3))l} \\ + e^{2\pi i (\frac{3}{6} + \varepsilon_{6H}(1))l} + (-\frac{1}{2} \mp \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{4}{6} + \varepsilon_{6H}(2))l} \\ + (-\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{3}) e^{2\pi i (\frac{5}{6} + \varepsilon_{6H}(3))l}] e^{2\pi i \frac{3}{24}l}, \quad (\text{D.9})$$

wobei beim \pm bzw. \mp das obere Zeichen für $h - k = 3r + 1$ und das untere für $h - k = 3r + 2$ gültig ist. Nach der Reihenentwicklung bis zur ersten Ordnung erhält man (D.10), wobei $e^{2\pi i \frac{1}{2}l} = 1$ und $e^{\frac{1}{3}\pi i l} = e^{\frac{2}{3}\pi i l} = 1$ für $l = 6s$ (s ganze Zahl) gilt. (D.10) entspricht (3.20) in Kap. 3.

$$F_{qf}(hk.l) = -2\pi l f_T^{\text{Si}}(hk.l) [\delta_{6H}(2) + \delta_{6H}(3) - 2\delta_{6H}(1)] \\ - 2\pi l f_T^{\text{C}}(hk.l) [\varepsilon_{6H}(2) + \varepsilon_{6H}(3) - 2\varepsilon_{6H}(1)] e^{\frac{1}{4}\pi i l} \quad (\text{D.10})$$

D.3 Strukturfaktoren unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen für 4H-SiC

Werden die Dispersionskorrekturen berücksichtigt, erhält der Strukturfaktor durch $\Delta f_X''$ einen zusätzlichen imaginären Anteil, der sich wie folgt auf das Betragsquadrat auswirkt. Für $l = 2, 14, 18, 30 \dots$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} |F_{\text{qt}}(hk.l)|^2 = & 16\pi^2 l^2 \left[\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 \right) \eta_{4H}^2 \right. \\ & + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 \right) \zeta_{4H}^2 \\ & - \sqrt{2} \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \right. \\ & \left. \left. - \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] - \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \right) \eta_{4H} \zeta_{4H} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

und für $l = 6, 10, 22, 26 \dots$:

$$\begin{aligned} |F_{\text{qt}}(hk.l)|^2 = & 16\pi^2 l^2 \left[\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 \right) \eta_{4H}^2 \right. \\ & + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 \right) \zeta_{4H}^2 \\ & + \sqrt{2} \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] - \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \right. \\ & \left. \left. - \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \right) \eta_{4H} \zeta_{4H} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

D.4 Strukturfaktoren unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen für 6H-SiC

Analog zu 4H-SiC ergibt sich für Typ I-Reflexe des Polytyps 6H-SiC (D.13) für $l = 2, 22, \dots$, (D.14) für $l = 4, 20, \dots$, (D.15) für $l = 8, 16, \dots$ und (D.16) für $l = 10, 14, \dots$

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(1)^2 \right. \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 3\left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(1)^2 \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad - 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad - 6\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad - 2\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \Big], \tag{D.13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(1)^2 \right. \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 3\left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(1)^2 \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(2)^2 \\
&\quad - 6\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad - 2\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad - 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad + 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \Big], \tag{D.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(1)^2 \right. \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 3\left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(1)^2 \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 6\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad + 2\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad - 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad + 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \left. \right], \tag{D.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left|F_{\text{qt}}(hk.l)\right|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[3\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(1)^2 \right. \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2\right)\eta_{6H}(2)^2 \\
&\quad + 3\left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(1)^2 \\
&\quad + \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2\right)\zeta_{6H}(2)^2 \\
&\quad - 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad + 2\sqrt{3}\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) \\
&\quad - 6\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(1) \\
&\quad - 2\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \quad \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]\text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]\right)\eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(2) \left. \right], \tag{D.16}
\end{aligned}$$

Für Typ II-Reflexe erhält man für $l = 6, 18, 30, 42 \dots$ (D.17), für $l = 12, 36, \dots$ (D.18) und für $l = 24, 48, \dots$ (D.19):

$$\begin{aligned}
|F_{\text{qf}}(hk.l)|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 \right) \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 \right) \zeta_{6H}(2)^2 \\
&+ 2 \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \left. \left. - \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \right) \eta_{6H}(2) \zeta_{6H}(2) \right]
\end{aligned} \tag{D.17}$$

$$\begin{aligned}
|F_{\text{qf}}(hk.l)|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 \right) \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 \right) \zeta_{6H}(2)^2 \\
&- 2 \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \eta_{6H}(2) \zeta_{6H}(2) \right]
\end{aligned} \tag{D.18}$$

$$\begin{aligned}
|F_{\text{qf}}(hk.l)|^2 &= 4\pi^2 l^2 \times \\
&\left[\left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)]^2 \right) \eta_{6H}(2)^2 \right. \\
&+ \left(\text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 + \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)]^2 \right) \zeta_{6H}(2)^2 \\
&+ 2 \left(\text{Re}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \text{Re}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right. \\
&\quad \left. + \text{Im}[f_T^{\text{Si}}(hk.l)] \text{Im}[f_T^{\text{C}}(hk.l)] \right) \eta_{6H}(2) \zeta_{6H}(2) \right]
\end{aligned} \tag{D.19}$$

D.5 Strukturfaktoren von 6H-SiC unter Berücksichtigung verschiedener Temperaturfaktoren innerhalb der Elementarzelle

In Kap. 3.4 wurde der Einfluss der Temperaturfaktoren auf den Strukturfaktor der „fastverbotenen“ Reflexe diskutiert. (3.32) gibt den Absolutbetrag des Strukturfaktors für 4H-SiC wieder. Analog lässt sich der Strukturfaktor auch für 6H-SiC darstellen:

$$\begin{aligned}
F_{\text{qf}}(hk.l) &= f_{\text{Si}}(hk.l) e^{-\bar{B}_{33}^{\text{Si}} \frac{l^2}{4c_{6H}^2}} \left[2\pi l \left(\mp \sqrt{3} \eta_{6H}(1) - i \zeta_{6H}(2) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4c_{6H}^2} l^2 \left(\mp i \sqrt{3} \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 3 \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right) \right] \\
&+ f_{\text{C}}(hk.l) e^{-\bar{B}_{33}^{\text{C}} \frac{l^2}{4c_{6H}^2}} \left[2\pi l \left(\mp \sqrt{3} \eta_{6H}(1) - i \zeta_{6H}(2) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4c_{6H}^2} l^2 \left(\mp i \sqrt{3} \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 3 \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right) \right] e^{\frac{1}{4} \pi i l},
\end{aligned} \tag{D.20}$$

wobei beim \mp das Minuszeichen für $l = 2, 8, 14, 20 \dots$ und das Pluszeichen für $l = 4, 10, 16, 22 \dots$ steht. Bildet man das Betragsquadrat von (D.20), so erhält man vier verschiedene Gleichungen für verschiedene MILLER-Indizes l . Exemplarisch soll hier nur das Quadrat des Strukturfaktors für $l = 2, 22 \dots$ gezeigt werden:

$$\begin{aligned}
|F_{\text{qf}}^{\text{DW}}(hk.l)|^2 = & f_{\text{Si}}(hk.l)^2 e^{-\bar{B}_{33}^{\text{Si}} \frac{l^2}{2c_{6H}^2}} \left[4\pi^2 l^2 \left(3\eta_{6H}(1)^2 + \eta_{6H}(2)^2 \right) \right. \\
& + \frac{\sqrt{3}}{c_{6H}^2} \pi l^3 \left(-3\eta_{6H}(1) \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right. \\
& \quad \left. + \eta_{6H}(2) \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right) \\
& + \frac{1}{16c_{6H}^4} l^4 \left(3 \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right)^2 \right. \\
& \quad \left. + \left(3 \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right)^2 \right) \left. \right] \\
& + f_{\text{C}}(hk.l)^2 e^{-\bar{B}_{33}^{\text{C}} \frac{l^2}{2c_{6H}^2}} \left[4\pi^2 l^2 \left(3\zeta_{6H}(1)^2 + \zeta_{6H}(2)^2 \right) \right. \\
& + \frac{\sqrt{3}}{c_{6H}^2} \pi l^3 \left(-3\zeta_{6H}(1) \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right. \\
& \quad \left. + \zeta_{6H}(2) \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right) \\
& + \frac{1}{16c_{6H}^4} l^4 \left(3 \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right)^2 \right. \\
& \quad \left. + \left(3 \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right)^2 \right) \left. \right] \\
& + f_{\text{Si}}(hk.l) f_{\text{C}}(hk.l) e^{-\left(\bar{B}_{33}^{\text{Si}} + \bar{B}_{33}^{\text{C}} \right) \frac{l^2}{4c_{6H}^2}} \\
& \times \left[-8\sqrt{3}\pi^2 l^2 \left(\eta_{6H}(1)\zeta_{6H}(2) - \eta_{6H}(2)\zeta_{6H}(1) \right) \right. \\
& + \frac{1}{c_{6H}^2} \pi l^3 \left(-3\eta_{6H}(1) \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right. \\
& \quad - 3\eta_{6H}(2) \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \\
& \quad + 3\zeta_{6H}(1) \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \\
& \quad + 3\zeta_{6H}(2) \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \\
& + \frac{\sqrt{3}}{8c_{6H}^4} l^4 \left(-3 \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \right. \\
& \quad \times \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \\
& \quad + 3 \left(\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2) + \Delta B_{33}^{\text{Si}}(3) \right) \\
& \quad \left. \left. \times \left(\Delta B_{33}^{\text{C}}(2) - \Delta B_{33}^{\text{C}}(3) \right) \right) \right] \tag{D.21}
\end{aligned}$$

E Lösung der Gleichungssysteme

Hier soll nun die analytische Lösung der Gleichungssysteme aus Kap. 3 vorgestellt werden. Allgemein lassen diese Gleichungen folgendermaßen schreiben:

$$a_1x_1^2 + 2a_2x_1x_2 + a_3x_2^2 + 2a_4x_1 + 2a_5x_2 = 1 \quad (\text{E.1})$$

(E.1) ist die allgemeine Kegelschnittgleichung. Bildet man eine Matrix aus den Koeffizienten a_1 , a_2 und a_3 in folgender Form:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 \end{pmatrix}, \quad (\text{E.2})$$

so ergibt sich für $\det(A) > 0$ eine Ellipse, für $\det(A) = 0$ zwei parallele Geraden und für $\det(A) < 0$ eine Hyperbel. Für alle im Rahmen dieser Arbeit vermessenen Reflexe war $\det(A) \geq 0$.

Für 4H-SiC und Typ II-Reflexe von 6H-SiC gilt $a_4 = 0$ und $a_5 = 0$, d.h. die Hauptachsen schneiden sich im Ursprung des Koordinatensystems. In diesem Fall gibt es im Allgemeinen vier Schnittpunkte zweier Ellipsen, es sei denn sie fallen zusammen oder die eine Ellipse beinhaltet die andere vollständig, womit es keinen Schnittpunkt gibt. Für das Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} a_1x_1^2 + 2a_2x_1x_2 + a_3x_2^2 &= 1 \\ b_1x_1^2 + 2b_2x_1x_2 + b_3x_2^2 &= 1 \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

gibt es folgende vier Lösungspaare $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$, $(x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$, $(x_1^{(3)}, x_2^{(3)})$ und $(x_1^{(4)}, x_2^{(4)})$, wobei jeweils zwei Paare punktsymmetrisch um den Ursprung des Koordinatensystems sind, d.h. $x_1^{(1)} = -x_1^{(3)}$, $x_2^{(1)} = -x_2^{(3)}$, $x_1^{(2)} = -x_1^{(4)}$ und $x_2^{(2)} = -x_2^{(4)}$. Die ersten beiden Lösungen sind folgende:

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} = & - \left(-a_2 + b_2 + \sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right) \\ & \times \left[2a_2^2b_1 - a_1a_3b_1 + a_3b_1^2 - 2a_1a_2b_2 - 2a_2b_1b_2 + 2a_1b_2^2 \right. \\ & \quad \left. + 2(-a_2b_1 + a_1b_2)\sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right. \\ & \quad \left. + a_1^2b_3 - a_1b_1b_3 \right]^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

$$\begin{aligned}
x_2^{(1)} = & (a_1 - b_1) \\
& \times \left[2a_2^2b_1 - a_1a_3b_1 + a_3b_1^2 - 2a_1a_2b_2 - 2a_2b_1b_2 + 2a_1b_2^2 \right. \\
& \quad \left. + 2(-a_2b_1 + a_1b_2) \sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right. \\
& \quad \left. + a_1^2b_3 - a_1b_1b_3 \right]^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{E.5}$$

und:

$$\begin{aligned}
x_1^{(2)} = & \left(a_2 - b_2 + \sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right) \\
& \times \left[2a_2^2b_1 - a_1a_3b_1 + a_3b_1^2 - 2a_1a_2b_2 - 2a_2b_1b_2 + 2a_1b_2^2 \right. \\
& \quad \left. + 2(a_2b_1 - a_1b_2) \sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right. \\
& \quad \left. + a_1^2b_3 - a_1b_1b_3 \right]^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{E.6}$$

$$\begin{aligned}
x_2^{(2)} = & -(a_1 - b_1) \\
& \times \left[2a_2^2b_1 - a_1a_3b_1 + a_3b_1^2 - 2a_1a_2b_2 - 2a_2b_1b_2 + 2a_1b_2^2 \right. \\
& \quad \left. + 2(a_2b_1 - a_1b_2) \sqrt{(a_2 - b_2)^2 - (a_1 - b_1)(a_3 - b_3)} \right. \\
& \quad \left. + a_1^2b_3 - a_1b_1b_3 \right]^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{E.7}$$

Die beiden anderen Lösungen werden durch Vorzeichenumkehr der oben dargestellten erhalten.

Für die Typ I-Reflexe des Polytyps 6H-SiC ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
a_1x_1^2 + 2a_2x_1x_2 + a_3x_2^2 + 2a_4x_1 + 2a_5x_2 &= 1 \\
b_1x_1^2 + 2b_2x_1x_2 + b_3x_2^2 + 2b_4x_1 + 2b_5x_2 &= 1
\end{aligned} \tag{E.8}$$

Um das Gleichungssystem zu vereinfachen, wird das Koordinatensystem so transformiert, so dass die Achsen des Koordinatensystems mit den zwei Hauptachsen der ersten Ellipse zusammenfallen. Dazu wird zuerst eine Hauptachsentransformation durchgeführt, um den gemischten Term $2a_2x_1x_2$ zu eliminieren und anschließend wird das Koordinatensystem verschoben, wobei mittels quadratischer Ergänzung der Verschiebungsvektor bestimmt wird. Damit erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
c_1y_1^2 + c_2y_2^2 &= 1 \\
d_1y_1^2 + 2d_2y_1y_2 + d_3y_2^2 + 2d_4y_1 + 2d_5y_2 &= 1
\end{aligned} \tag{E.9}$$

Durch Eliminieren der Variable y_2 in (E.9) kann man eine Gleichung vierten Grades erhalten:

$$\begin{aligned}
& (c_2^2 d_1^2 + 4c_1 c_2 d_2^2 - 2c_1 c_2 d_1 d_3 + c_1^2 d_3^2) y_1^4 \\
& + (4c_2^2 d_1 d_4 - 4c_1 c_2 d_3 d_4 + 8c_1 c_2 d_2 d_5) y_1^3 \\
& + (-2c_2^2 d_1 - 4c_2 d_2^2 + 2c_1 c_2 d_3 + 2c_2 d_1 d_3 - 2c_1 d_3^2 + 4c_2^2 d_4^2 + 4c_1 c_2 d_5^2) y_1^2 \\
& + (-4c_2^2 d_4 + 4c_2 d_3 d_4 - 8c_2 d_2 d_5) y_1 \\
& + c_2^2 - 2c_2 d_3 + d_3^2 - 4c_2 d_5^2 = 0
\end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Gleichung (E.10) ergibt vier Lösungen für y_1 , die mit $y_1^{(1)}$, $y_1^{(2)}$, $y_1^{(3)}$ und $y_1^{(4)}$ bezeichnet werden:

$$y_1^{(1)} = -\frac{e_1}{2e_2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8e_1^2}{e_2^2} - \frac{8e_4}{3e_2} - \frac{\sqrt[3]{e_7}}{3\sqrt[3]{2}e_2} - \frac{\sqrt[3]{2}e_8}{3e_2\sqrt[3]{e_7}} - \frac{-\frac{64e_1^3}{e_2^3} + \frac{32e_3}{e_2} + \frac{32e_1e_4}{e_2^2}}{4\sqrt{e_9}}} - \frac{\sqrt{e_9}}{2} \quad (\text{E.11})$$

$$y_1^{(2)} = -\frac{e_1}{2e_2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8e_1^2}{e_2^2} - \frac{8e_4}{3e_2} - \frac{\sqrt[3]{e_7}}{3\sqrt[3]{2}e_2} - \frac{\sqrt[3]{2}e_8}{3e_2\sqrt[3]{e_7}} - \frac{-\frac{64e_1^3}{e_2^3} + \frac{32e_3}{e_2} + \frac{32e_1e_4}{e_2^2}}{4\sqrt{e_9}}} - \frac{\sqrt{e_9}}{2} \quad (\text{E.12})$$

$$y_1^{(3)} = -\frac{e_1}{2e_2} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8e_1^2}{e_2^2} - \frac{8e_4}{3e_2} - \frac{\sqrt[3]{e_7}}{3\sqrt[3]{2}e_2} - \frac{\sqrt[3]{2}e_8}{3e_2\sqrt[3]{e_7}} - \frac{-\frac{64e_1^3}{e_2^3} + \frac{32e_3}{e_2} + \frac{32e_1e_4}{e_2^2}}{4\sqrt{e_9}}} + \frac{\sqrt{e_9}}{2} \quad (\text{E.13})$$

$$y_1^{(4)} = -\frac{e_1}{2e_2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8e_1^2}{e_2^2} - \frac{8e_4}{3e_2} - \frac{\sqrt[3]{e_7}}{3\sqrt[3]{2}e_2} - \frac{\sqrt[3]{2}e_8}{3e_2\sqrt[3]{e_7}} - \frac{-\frac{64e_1^3}{e_2^3} + \frac{32e_3}{e_2} + \frac{32e_1e_4}{e_2^2}}{4\sqrt{e_9}}} + \frac{\sqrt{e_9}}{2} \quad (\text{E.14})$$

wobei gilt:

$$e_9 = \frac{4e_1^2}{e_2^2} - \frac{4e_4}{3e_2} + \frac{\sqrt[3]{e_7}}{3\sqrt[3]{2}e_2} + \frac{\sqrt[3]{2}e_8}{3e_2\sqrt[3]{e_7}} \quad (\text{E.15})$$

$$e_8 = 48e_1e_3 + 4e_4^2 + 12e_2e_5 \quad (\text{E.16})$$

$$e_7 = 432e_2e_3^2 - 288e_1e_3e_4 - 16e_4^2 + 432e_1^2e_5 + 144e_2e_4e_5 + e_6 \quad (\text{E.17})$$

$$\begin{aligned}
e_6 = & \left[-4(48e_1e_3 + 4e_4^2 + 12e_2e_5)^3 \right. \\
& \left. + (432e_2e_3^2 - 288e_1e_3e_4 - 16e_4^2 + 432e_1^2e_5 + 144e_2e_4e_5)^2 \right]^{\frac{1}{3}}
\end{aligned} \quad (\text{E.18})$$

$$e_5 = c_2^2 - 2c_2d_3 + d_3^2 - 4c_2d_5^2 \quad (\text{E.19})$$

$$e_4 = c_2^2d_1 + 2c_2d_2^2 - c_1c_2d_3 - c_2d_1d_3 + c_1d_3^2 - 2c_2^2d_4^2 - 2c_1c_2d_5^2 \quad (\text{E.20})$$

$$e_3 = c_2^2d_4 - c_2d_3d_4 + 2c_2d_2d_5 \quad (\text{E.21})$$

$$e_2 = c_2^2 d_1^2 + 4c_1 c_2 d_2^2 - 2c_1 c_2 d_1 d_3 + c_1^2 d_3^2 \quad (\text{E.22})$$

$$e_1 = c_2^2 d_1 d_4 - c_1 c_2 d_3 d_4 + 2c_1 c_2 d_2 d_5 \quad (\text{E.23})$$

Die Lösung für y_2 ergibt sich durch Einsetzen der Lösungen von y_1 in (E.24):

$$y_2 = \pm \frac{\sqrt{1 - c_1 y_1^2}}{c_2} \quad (\text{E.24})$$

Für jedes y_1 erhält man zwei Lösungen für y_2 , also insgesamt acht Lösungspaare, von denen allerdings nur vier das Gleichungssystem (E.9) erfüllen. Durch Rücktransformation von y_1 und y_2 der vier Lösungen in das ursprüngliche Koordinatensystem erhält man die vier Lösungspaare $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$, $(x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$, $(x_1^{(3)}, x_2^{(3)})$ und $(x_1^{(4)}, x_2^{(4)})$.

Diese Lösungen müssen nicht reell sein. Haben die Ellipsen keinen Schnittpunkt haben alle Lösungsvariablen einen Imaginäranteil, bei zwei Schnittpunkten gibt es zwei reelle Lösungspaare und bei vier Schnittpunkten sind alle Lösungspaare reell.

Verzeichnis der Symbole, Konstanten und Abkürzungen

In dieser Arbeit wurden folgende Konventionen gemacht: Eigennamen sind durch Kapitälchendruck hervorgehoben, fremdsprachliche Ausdrücke kursiv gedruckt. Als Dezimaltrennzeichen wird ein Punkt verwendet. Variablen sind kursiv, Vektoren erscheinen in Fettdruck oder besitzen ein Pfeil und Konstanten erscheinen in aufrechten Satz. Bei hexagonalen oder rhomboedrischen Reflexen wird bei den MILLERSchen Indizes der dritte Index durch einen Punkt ersetzt (*hk.l* statt *hki*l). Bei Richtungen oder Flächen werden alle vier Indizes benützt. Kristallographische Flächen werden in runden Klammern, Richtungen in eckigen und Reflexe ohne Klammern dargestellt.

A Symbole

A, B, C	Stapellagen in einer dichtesten Kugelpackung.
A_0	Querschnittsfläche des ankommenden Röntgenstrahles.
A_1, A_2	Amplituden.
A_{res}	Resultierende Amplitude.
a	a -Gitterkonstante.
a, b	WYCKOFF- <i>Letters</i> .
a_1, a_2, a_3, a_4	Koeffizienten des Atomformfaktors.
b_1, b_2, b_3, b_4, c	
$a_{\sigma\pi}, b_{\sigma\pi}, c_{\sigma\pi}$	Summanden der Dreistrahlintensität.
$a_{3C(k)}$	kubische Gitterkonstante des SiC-Polytypes 3C.
a_{cub}	kubische Gitterkonstante.
a_{hex}	a -Gitterkonstante im hexagonalen System.

a_{nH}	a -Gitterkonstante des hexagonalen SiC Polytypes nH .
a_{nY}	a -Gitterkonstante des SiC Polytypes nY .
B_X, B_{Si}, B_C	Temperaturfaktor für das Element X , für Silizium (Si) und für Kohlenstoff (C).
$B_{33}^X(j), B_{33}^{Si}(j), B_{33}^C(j)$	Temperaturfaktor in c -Richtung des j -ten Atomes in der Elementarzelle des Elements X , von Silizium, von Kohlenstoff.
$\bar{B}_{33}^X, \bar{B}_{33}^{Si}, \bar{B}_{33}^C$	mittlerer Temperaturfaktor in c -Richtung des j -ten Atomes in der Elementarzelle des Elements X , von Silizium, von Kohlenstoff.
c	c -Gitterkonstante.
c_{hex}	c -Gitterkonstante im hexagonalen System.
c_{nY}, c_{nH}	c -Gitterkonstante des SiC Polytyps nY, nH .
$(c_{nY})_{mo}$	c -Gitterkonstante des SiC Polytyps nY berechnet nach dem Modell des modularen Aufbaus.
D	dielektrische Verschiebung.
d	Dicke des Kristalls.
d_0^{4H}, d_0^{6H}	ideale Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage.
$d_{4H}^{Si}(j), d_{4H}^C(j)$	Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage für $4H$ -SiC bezogen auf die Silizium, Kohlenstoffatome.
$d_{6H}^{Si}(j), d_{6H}^C(j)$	Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage für $6H$ -SiC bezogen auf die Silizium, Kohlenstoffatome.
d_{hkl}	Netzebenenabstand eines Reflexes mit den MILLERSchen Indizes h, k, l .
d_H, d_L, \dots	Netzebenenabstand des Reflexes H , L ,...
$d_{hk}, d_{kk}, d_{kh},$	Dicken von Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen bezogen auf die Siliziumatome, die eine SiC Bindung in hexagonaler, kubischer, kubischer Umgebung und die Bindung des Übergangs zu einer kubischen, kubischen, hexagonalen Doppellage enthalten.
\hat{e}_z	Einheitsvektor in z -Richtung.
F, F_0, F_{SiC}, F_{qf}	Strukturfaktor, Strukturfaktor im unrelaxierten Gitter, von SiC, eines „fastverbotenen“ Reflexes.
$F_{qf}^{mea}, F_{qf}^{cal}$	aus Messdaten, aus vorgegebenen Relaxationsparametern bestimmter Strukturfaktor eines „fastverbotenen“ Reflexes.
F'_{SiC}, F''_{SiC}	Strukturfaktor von SiC beinhaltet nur Real- bzw. Imaginärteil der Dispersionskorrekturen

$f_0^X, f_0^{\text{Si}}, f_0^{\text{C}}$	Atomformfaktoren für das Element X , für Silizium (Si) und für Kohlenstoff (C).
$f_{\text{T}}^X, f_{\text{T}}^{\text{Si}}, f_{\text{T}}^{\text{C}}$	modifizierter Atomformfaktor unter Berücksichtigung der Dispersionskorrekturen und der Temperaturfaktoren für das Element X , für Silizium (Si) und für Kohlenstoff (C).
g_{hex}	Grad der Hexagonalität
H	reziproker Gittervektor eines „fastverbotenen“ Reflexes.
$\hat{\mathbf{H}}$	normierter reziproker Gittervektor eines „fastverbotenen“ Reflexes.
h	Bezeichnung einer hexagonalen Umgebung in einer Siliziumkarbid-elementarzone.
h, k, l	MILLERSche Indizes.
$h_{\text{H}}, k_{\text{H}}, l_{\text{H}}$	MILLERSche Indizes des Reflexes H .
$h_{\text{L}}, k_{\text{L}}, l_{\text{L}}$	MILLERSche Indizes des Reflexes L .
$h_{\text{cub}}, k_{\text{cub}}, l_{\text{cub}}$	MILLERSche Indizes (kubisch).
$h_{\text{hex}}, k_{\text{hex}}, l_{\text{hex}}, i_{\text{hex}}$	MILLERSche Indizes (hexagonal).
I	Intensität (allgemein)
I_{σ}	Intensität des σ -polarisierten Röntgenstrahles.
I_{π}	Intensität des π -polarisierten Röntgenstrahles.
$I_{\text{H}}^{\text{na}}, I_{\text{H}}$	Integralintensität nach der kinematischen Theorie des Reflexes H ohne Absorption, mit Absorption.
$I_{\text{qf}}^{\text{mea}}, I_{\text{Si}}^{\text{mea}}$	gemessene Integralintensität eines „fastverbotenen“, eines Silizium Reflexes.
j	Laufindex
$K\alpha_1$	Bezeichnung der charakteristischen Röntgenlinie.
k	Bezeichnung einer kubischen Umgebung in einer Siliziumkarbid-elementarzone.
\mathbf{k}_0	Wellenvektor des einfallenden Röntgenstrahles.
k_0	Betrag des Wellenvektors des einfallenden Röntgenstrahles.
$\mathbf{k}_{\text{H}}, \mathbf{k}_{\text{L}}$	Wellenvektor des gebeugten Röntgenstrahles des Reflexes H , L .
$k_{\text{L}\pi}, k_{\text{Ln}}, k_{\text{Ln}\pi}$	Skalare nach der SHEN'schen Theorie
L	reziproker Gittervektor eines starken Reflexes.

$\hat{\mathbf{L}}$	normierter reziproker Gittervektor eines starken Reflexes.
L_h, L_k	Bindungslänge parallel c innerhalb einer hexagonalen, kubischen Doppellage.
L_{nY}	Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge parallel c .
L_σ	Skalar nach der SHEN'schen Theorie
l_{nY}	Bindungslänge vom j -ten Kohlenstoff bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die $[0001]$ -Ebene.
$l_{hh}, l_{hk}, l_{kk}, l_{kh}$	Bindungslänge vom j -ten Kohlenstoff bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die $[0001]$ -Ebene beim Übergang von hexagonalen, hexagonalen, kubischen, kubischen zu einer hexagonalen, kubischen, kubischen, hexagonalen Doppellage.
N	Anzahl der Elementarzellen in einem Kristallit.
n	ganze Zahl.
n	Anzahl der Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen in der Elementarzelle.
$\hat{\mathbf{n}}$	Einheitsvektor in Richtung des abgelenkten Strahls.
\vec{p}_L	Projektion des normierten reziproken Gittervektors $\hat{\mathbf{L}}$ auf die Netzebene \mathbf{H} .
\vec{p}_z	Projektion des Einheitsvektors in z -Richtung \hat{e}_z auf die Netzebene \mathbf{H} .
P	Polarisationsfaktor.
R	Gütefaktor
\mathbf{r}_j	Ortsvektor eines Atoms in der Elementarzelle
r, s	ganze Zahlen
$t_{\text{abs}}, t_{\text{ext}}$	Absorptions- bzw. Extinktionstiefe.
T	Temperatur (absolut).
V_C	Volumen der Elementarzelle.
V_{nY}, V_{nH}	Volumen der Elementarzelle.
\bar{V}	mittleres Volumen.
w	Halbwertsbreite eines Dreistrahl- <i>Peaks</i> .
$x_j^{\text{hex}}, y_j^{\text{hex}}, z_j^{\text{hex}}$	Ortskoordinaten im hexagonalen System.
X	Variable für Kohlenstoff (C) oder Silizium (Si).

\mathbf{x}, \mathbf{x}'	Ortsvektoren.
Y	Variable für H (hexagonal) oder R (rhomboedrisch).
z	z -Koordinate.
2θ	Detektorwinkel.
2ω	Detektorwinkel (6-Kreis-Goniometer horizontal).
$\alpha_{\mathbf{HL}}$	Winkel zwischen den Netzebenen \mathbf{H} und \mathbf{L} .
Γ	$r_e \lambda^2 / (\pi V_C)$.
$\gamma_{\mathbf{HL}}$	$\Gamma F_{\mathbf{H-L}} F_{\mathbf{L}} / F_{\mathbf{H}} $
$\Delta B_{33}^X(j), \Delta B_{33}^{\text{Si}}(j),$ $\Delta B_{33}^{\text{C}}(j)$	Änderung vom mittleren Temperaturfaktor in c -Richtung des j -ten Atomes in der Elementarzelle des Elements X , von Silizium, von Kohlenstoff.
$\Delta d_{4H}^{\text{Si}}(j), \Delta d_{4H}^{\text{C}}(j)$	Änderung der Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage für $4H$ -SiC bezogen auf die Silizium, Kohlenstoffatome.
$\Delta d_{6H}^{\text{Si}}(j), \Delta d_{6H}^{\text{C}}(j)$	Dicke einer Silizium-Kohlenstoff-Doppellage für $6H$ -SiC bezogen auf die Silizium, Kohlenstoffatome.
$\Delta f'_X, \Delta f'_{\text{Si}}, \Delta f'_C$	Realteil der Dispersionskorrektur des Elementes X , von Silizium (Si) und von Kohlenstoff (C).
$\Delta f''_X, \Delta f''_{\text{Si}}, \Delta f''_C$	Imaginärteil der Dispersionskorrektur des Elementes X , von Silizium (Si) und von Kohlenstoff (C).
$\Delta L_{nY}(i;j)$	Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge in c -Richtung vom j -ten Siliziumatom bis zum j -ten Kohlenstoffatom.
$\Delta l_{nY}(i;j)$	Änderungen der Silizium-Kohlenstoff-Bindungslänge vom j -ten Kohlenstoffatom bis zum $(j+1)$ -ten Siliziumatom projiziert auf die $[0001]$ -Richtung.
$\Delta\theta$	Strahldivergenz in der Dispersionsebene.
$\Delta\psi$	Azimutaler Winkel bezogen auf das Zentrum eines Mehrstrahl- <i>Peaks</i>
$\Delta(\psi)$	Resonanzphase.
$\delta\epsilon$	Funktion proportional der elektrischen Ladungsdichte.
$\delta_{nY}(j), \delta'_{nY}(j),$ $\epsilon_{nY}(j), \epsilon'_{nY}(j)$	Strukturverfeinerungsparameter für Silizium bzw. Kohlenstoff des Polytypen nY .
$\delta_{2H}, \delta_{nH}(j), \delta_{nH}(j),$ $\delta'_{2H}, \delta'_{nH}(j), \delta'_{nR}(j)$	Strukturverfeinerungsparameter für Silizium des Polytypes $2H$, hexagonaler Polytypen nH , rhomboedrischer Polytypen nR .
$\epsilon_{2H}, \epsilon_{nH}(j), \epsilon_{nH}(j),$ $\epsilon'_{2H}, \epsilon'_{nH}(j), \epsilon'_{nR}(j)$	Strukturverfeinerungsparameter für Kohlenstoff des Polytypes $2H$, hexagonaler Polytypen nH , rhomboedrischer Polytypen nR .

η_{4H}, ζ_{4H}	Relaxationsparameter von 4H-SiC.
$\eta_{6H}(1), \eta_{6H}(2), \zeta_{6H}(1)$	Relaxationsparameter von 6H-SiC.
θ	BRAGG-Winkel
θ_B	BRAGG-Winkel
λ	Wellenlänge.
μ_{SiC}	Linearer Absorptionskoeffizient für SiC.
$\lambda_{K\alpha 1}$	Wellenlänge der charakteristischen $K_{\alpha 1}$ -Strahlung.
π	parallele Polarisation.
$\hat{\pi}, \hat{\pi}_0$	Einheitsvektoren senkrecht zum gebeugten, ankommenden Strahl in der Dispersionsebene.
ρ_{kin}, ρ_{dyn}	Integralintensität nach der kinematischen, dynamische Theorie.
ρ_{qf}^{ga}	geeichte Integralintensität eines „fastverbotenen“ Reflexes.
ρ_{Si}^{dyn}	Intrinsische Integralintensität eines Siliziumreflexes nach der dynamischen Theorie.
$\xi_j(X)$	Atomkoordinaten der hexagonalen und rhomboedrischen Polytypen; X steht für C oder Si.
σ	normale Polarisation.
$\hat{\sigma}, \hat{\sigma}_0$	Einheitsvektoren senkrecht zum gebeugten, ankommenden Strahl senkrecht zur Dispersionsebene.
Φ_0	Photonenfluss.
ϕ	Drehwinkel um die Probenachsennormalen.
φ_1, φ_2	Phasen.
φ_3	Phasentriplett.
$\varphi_H, \varphi_L, \varphi_{H-L}$	Phase des Reflexes H , L , H-L .
φ_{tot}	totale Phasendifferenz.
χ	Verkippungswinkel der Probe senkrecht zur Dispersionsebene.
ψ	azimuthaler Winkel bei Mehrstrahlfällen.
ψ_0	Winkel zwischen \vec{p}_z und \vec{p}_L .
ψ_H	Azimet des Reflexes H .
ψ_L	Winkel zwischen den zwei Schnittpunkten des Kosselkreises des Reflexes L mit dem Kosselkreis des Reflexes H .

ω	Drehwinkel der Probe in der Dispersionsebene.
ω_i, ω_e	Einfalls- bzw. Ausfallswinkel des Röntgenstrahls bezogen auf die Probenoberfläche.

B Konstanten

e	2.718281	EULERSche Zahl.
I	$i^2 = -1$	imaginäre Einheit.
r_e	$2.818 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	klassischer Elektronenradius
π	3.141592	Kreiszahl.
V_{4H}	$8.28787 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$	Volumen der Elementarzelle von 4H-SiC
V_{6H}	$1.24319 \cdot 10^{-28} \text{ m}^3$	Volumen der Elementarzelle von 6H-SiC

C Abkürzungen

ANNI	<i>Axial Next-Nearest Neighbour Ising.</i>
BM	<i>Bending Magnet</i> (Ablenkmagnet).
CVD	<i>Chemical-Vapour-Deposition</i> (Gasphasenepitaxie).
ESRF	<i>European Synchrotron Radiation Facility.</i>
<i>fcc</i>	<i>face-centered-cubic</i> (kubisch flächenzentriert).
JARD	Jenaer Automatisches Röntgendiffraktometer.
LPE	<i>Liquid-Phase-Epitaxy</i> (Flüssigphasenepitaxie).
LED	<i>Light Emitting Diode</i> (Leuchtdiode).
MBE	<i>Molecular-Beam-Epitaxy</i> (Molekularstrahlepitaxie).
RF	Radio Frequenz (13.56 MHz).
ROBL	Rosendorfer Beamline.

Abbildungsverzeichnis

- Abb. 2.1: Erklärung der Stapelfolgen anhand des Modells der dichtesten Kugelpackungen.
- Abb. 2.2: Elementarzellen der Siliziumkarbid-Polytypen $3C$, $2H$, $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Abb. 3.1: Elementarzellen von $4H$ - und $6H$ -SiC.
- Abb. 3.2: Atomformfaktoren für Silizium und Kohlenstoff.
- Abb. 3.3: Graphische Lösung des Gleichungssystems für $4H$ -SiC für das vorgegebene Modell KÄCKELL.
- Abb. 3.4: Elementarzelle von $4H$ -SiC.
- Abb. 3.5: Elementarzelle von $6H$ -SiC.
- Abb. 3.6: Einfluss der Temperaturfaktoren auf den Strukturfaktor von $4H$ -SiC 00.1 Reflexen.
- Abb. 4.1: Lösungen für $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ aus $6H$ -SiC Typ I Reflexen bei vorgegebenen $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$ aus dem Modell KÄCKELL.
- Abb. 4.2: Dreistrahlfall am Beispiel von $6H$ -SiC im realen und im reziproken Raum.
- Abb. 4.3: Resonanzphase $\Delta(\psi)$ in der Umgebung des Dreistrahlfalles.
- Abb. 4.4: KOSSEL-Kegel für das $6H$ -SiC Gitter für eine Wellenlänge von 0.32 nm.
- Abb. 4.5: Schnittpunkte zweier KOSSEL-Kreise im allgemeinen Fall.
- Abb. 4.6: λ - ψ -Darstellung des $6H$ -SiC 00. $\bar{8}$ Reflexes im Wellenlängenbereich von 0.10 nm bis 0.29 nm.
- Abb. 4.7: Ausschnitt der λ - ψ -Darstellung von Abb. 4.6.
- Abb. 4.8: Illustration eines Zweistrahlfalles.
- Abb. 4.9: Vergleich eines Dreistrahlprofils der kinematischen Näherung nach SHEN mit der dynamischen Berechnung nach WECKERT.
- Abb. 4.10: Dreistrahlprofile für einen „fastverbotenen“ Reflex und zwei starke Reflexe in Abhängigkeit der Dreistrahlphase.

- Abb. 4.11: Dreistrahlprofil des primären $6H$ -SiC Reflexes $00.\bar{8}$ und sekundären Reflexes 01.2 im *out* \rightarrow *in* Fall (π -Polarisation) des Modells KÄCKELL sowie Dreistrahlprofil bei Vertauschung des Vorzeichens der Relaxationsparameter.
- Abb. 5.1: Schematischer Aufbau des Drehanodensystems mit hochauflösenden Röntgendiffraktometer und vorgesetztem BARTELS-Monochromator.
- Abb. 5.2: Schema der Röntgenoptik der ROBL *Beamline*.
- Abb. 5.3: Sechs-Kreis-Goniometer bei ROBL.
- Abb. 5.4: Messprinzip der BOND-Methode.
- Abb. 6.1: Umweg-Scan des $4H$ -SiC 00.10 Reflexes.
- Abb. 6.2: Simulierter und gemessener ψ -scan des $4H$ -SiC 00.2 Reflexes.
- Abb. 6.3: Lösungsellipsen für $4H$ -SiC.
- Abb. 6.4: Lösungsellipsen nach (3.32) für $\Delta B_{33}^{\text{Si}}(2)$ und $\Delta B_{33}^{\text{C}}(2)$ mit $\eta_{4H} \equiv 0$, $\zeta_{4H} \equiv 0$, $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$ und $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$.
- Abb. 6.5: Lösungsellipsen analog zu Abb. 6.4 für die Strukturparameter aus Tab. 6.3 (Synchrotron), mit $\bar{B}_{33}^{\text{Si}} = 0.410 \text{ \AA}^2$, $\bar{B}_{33}^{\text{C}} = 0.545 \text{ \AA}^2$.
- Abb. 6.6: Experimenteller und simulierte ψ -scans zur eindeutigen Bestimmung der Relaxationsparameter bei $4H$ -SiC.
- Abb. 6.7: Lösungsellipsen für $6H$ -SiC Typ II Reflexe.
- Abb. 6.8: Lösungsellipsen für $6H$ -SiC Typ I Reflexe (Drehanode).
- Abb. 6.9: Lösungsellipsen für $6H$ -SiC Typ I Reflexe (Synchrotron).
- Abb. 6.10: Experimenteller und simulierte ψ -scans zur eindeutigen Bestimmung der Relaxationsparameter bei $6H$ -SiC.
- Abb. 7.1: a - und c -Gitterkonstanten der SiC-Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Abb. 7.2: $c/(na)$ -Verhältnis der SiC-Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Abb. 7.3: $c/(na)$ -Verhältnis in Abhängigkeit von der Hexagonalität.
- Abb. 7.4: Volumen der Elementarzellen V_{nY}/n bezogen auf die Stapelperiode der Siliziumkarbid-Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Abb. 7.5: Elementarzellen von $4H$ - und $6H$ -SiC.
- Abb. 7.6: Vergleichbare Segmente der Elementarzellen von $4H$ - und $6H$ -SiC.
- Abb. 7.7.: Ausschnitt der Elementarzellen von $15R$ - und $21R$ -SiC (jeweils $\frac{1}{3}$).
- Abb. 7.8: Nach dem Modell des modularen Aufbaus berechnete Gitterparameter c/n , sowie die experimentell bestimmten Parameter.
- Abb. 7.9: Dicken von Si-C-Doppellagen und Bindungslängen in c -Richtung, die für das Modell des modularen Aufbaus nötig sind.

- Abb. A.1.: Darstellung der BRAGGschen Reflexionsbedingung an den Netzebenen eines Kristalls im realen Raum und Darstellung LAUE-Bedingung im reziproken Raum
- Abb. A.2.: Beugungsgeometrie an einem ebenen Kristall.
- Abb. C.1.: realer Anteil der Dispersionskorrektur für Silizium und für Kohlenstoff.
- Abb. C.2.: imaginärer Anteil der Dispersionskorrektur für Silizium und für Kohlenstoff.

Tabellenverzeichnis

- Tab. 2.1: Materialparameter einiger SiC-Polytypen.
- Tab. 2.2: Notationen zur Beschreibung der Siliziumkarbid-Polytypen $3C$, $4H$, $6H$ und $15R$ nach RAMSDELL, JAGODZINSKI, HÄGG und ZHDANOV,.
- Tab. 2.3: RAMSDELL-Notation, Stapelfolge, Hexagonalität sowie Raumgruppe einiger Siliziumkarbid-Polytypen.
- Tab. 3.1: Strukturgrößen von $2H$ -, $4H$ -, $6H$ und $15R$ -SiC aus *ab-initio* Rechnungen nach CHENG und KÄCKELL.
- Tab. 3.2: Strukturgrößen von $6H$ -SiC nach GOMES DE MESQUITA.
- Tab. 3.3: Strukturgrößen des Polytypen $6H$ -SiC nach KUSCHNERUS, sowie nach GOMES DE MESQUITA, CHENG und KÄCKELL.
- Tab. 3.4: Regeln für das Auftreten von starken Reflexen, „fastverbotenen“ und strukturel verbotenen Reflexen von $4H$ - und $6H$ -SiC.
- Tab. 3.5: Absolutbetrag der Strukturaktoren für die relaxierte und für die unrelaxierte Struktur der „fastverbotenen“ und starken Reflexe von $6H$ -SiC, sowie die Integralintensitäten der relaxierten Struktur nach der dynamischen Theorie ρ_{dyn} bzw. in kinematischer Näherung.
- Tab. 3.6: Temperaturaktoren für $6H$ -SiC bei Raumtemperatur nach GOMES DE MESQUITA, BRAM und ZYWIETZ *et al.*.
- Tab. 5.1: Charakteristiken des Vierfach-Monochromators nach MÖLLER (1994).
- Tab. 6.1: Gemessene Integralintensität des Silizium 333 Reflexes, sowie die nach der dynamischen Theorie berechnete intrinsische Integralintensität.
- Tab. 6.2: Integralintensitäten und Strukturaktoren der an dem Drehanodensystem gemessenen Reflexe 00.2, 00.6 und 00.10 von $4H$ -SiC.
- Tab. 6.3: Integralintensitäten und Strukturaktoren der am Synchrotron gemessenen Reflexe 00.2, 00.6 und 00.10 von $4H$ -SiC.

- Tab. 6.4: Lösungen des Gleichungssystems η_{4H} und ζ_{4H} für das Modell $+1_{4H}$.
- Tab. 6.5: Ergebnisse der *least-squares* Verfeinerung.
- Tab. 6.6: Schnittpunkte der Ellipsen aus Abb. 7.6 für das Modell $+1_{4H}$.
- Tab. 6.7: Phaseninvariante der Umwegreflexe \mathbf{L} und \mathbf{L}' der $4H$ -SiC Relaxationsmodelle $+1_{4H}$ und -1_{4H} .
- Tab. 6.8: Vergleich der am Synchrotron gemessenen Strukturfaktorbeträge mit denen aus den Relaxationsparametern nach (3.4) berechneten.
- Tab. 6.9: Relaxationsparameter η_{4H} und ζ_{4H} von $4H$ -SiC.
- Tab. 6.10: Geeichte Integralintensitäten sowie der daraus bestimmten Absolutbeträge der Strukturfaktoren der an dem Drehanodensystem gemessenen „fastverbotenen“ $6H$ -SiC Reflexe.
- Tab. 6.11: Geeichte Integralintensitäten sowie der daraus bestimmten Absolutbeträge der Strukturfaktoren der am Synchrotron gemessenen „fastverbotenen“ Typ I- und Typ II $6H$ -SiC Reflexe.
- Tab. 6.12: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(2)$ und $\zeta_{6H}(2)$.
- Tab. 6.13: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ (Drehanode).
- Tab. 6.14: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(1)$ (Synchrotron).
- Tab. 6.15: Phaseninvariante der Umwegreflexe \mathbf{L} und \mathbf{L}' der $6H$ -SiC Relaxationsmodelle $+1_{6H}$ und -1_{6H} .
- Tab. 6.16: Relaxationsparameter $\eta_{6H}(1)$, $\eta_{6H}(2)$, $\zeta_{6H}(1)$ und $\zeta_{6H}(2)$ bestimmt aus den Messungen am Synchrotron.
- Tab. 6.17: Vergleich der am Synchrotron gemessenen Strukturfaktorbeträge mit denen aus Relaxationsparametern nach (3.12) berechneten.
- Tab. 6.18: c -Gitterkonstante der SiC-Polytypen $15R$ und $21R$.
- Tab. 6.19: a -Gitterkonstante der SiC-Polytypen $15R$ und $21R$.
- Tab. 7.1: Gitterparameter SiC-Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Tab. 7.2: Extrapolierte Gitterparameter der Polytypen $3C$ und $2H$.
- Tab. 7.3: Gitterparameter einiger ausgesuchter Polytypen bei Raumtemperatur.
- Tab. 7.4: Volumen der Elementarzellen bezogen auf die Stapelperiode der SiC-Polytypen $4H$, $6H$, $15R$ und $21R$.
- Tab. 7.5: Vergleich der $4H$ -SiC Parameter $\Delta d_{4H}^X(j)/d_0^{4H}$, $\Delta L_{4H}(i;j)/L_0^{4H}$ und $\Delta l_{4H}(i;j)/l_0^{4H}$ den Werten von KÄCKELL und CHENG.
- Tab. 7.6: Vergleich der $6H$ -SiC Parameter $\Delta d_{6H}^X(j)/d_0^{6H}$, $\Delta L_{6H}(i;j)/L_0^{6H}$ und $\Delta l_{6H}(i;j)/l_0^{6H}$ mit den Werten von KÄCKELL und CHENG.
- Tab. 7.7.: Dicken von Silizium-Kohlenstoff-Doppellagen

-
- Tab. 7.8.: Berechnete c -Gitterkonstante von $4H$ -SiC, deren Normierung auf eine Si-C-Doppelschicht und die Abweichung von der experimentell bestimmten Gitterkonstante.
- Tab. 7.9.: Berechnete c -Gitterkonstante der Polytypen $15R$ und $21R$ nach dem Modell des modularen Aufbaus
- Tab. 7.10.: Absolute Bindungslängen L_{nH} und l_{nH} berechnet aus den Relaxationsparametern nach CHENG und KÄCKELL und den Gitterparametern aus dieser Arbeit.
- Tab. 7.11.: Relaxationsparameter δ_{nY} und ε_{nY} von $15R$ - und $21R$ -SiC, die aus den $6H$ -SiC Parametern berechnet wurden.
- Tab. C.1.: Koeffizienten des Atomformfaktors für Silizium.
- Tab. C.2.: Koeffizienten des Atomformfaktors für Kohlenstoff.
- Tab. C.3.: Dispersionskorrekturen.
- Tab. C.4.: Dispersionskorrektur $\Delta f_X''$ ($X = \text{Si, C}$) und μ_{SiC}

Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt all denen, die zum Entstehen dieser Arbeit am Institut für Optik und Quantenelektronik beigetragen haben. Insbesondere möchte ich folgenden Personen danken:

- Herrn Prof. DR. KONRAD GOETZ danke ich für die Möglichkeit diese Arbeit am Institut für Optik und Quantenelektronik durchführen zu können, für sein stetes Interesse an dieser Arbeit, die ergiebigen wissenschaftlichen Diskussionen und seine vielfältigen Anregungen, die wesentlich zur Entstehung dieser Dissertation beitrugen.
- Herrn DR. JÜRGEN KRÄUBLICH danke ich für seine stete Hilfsbereitschaft, seine Diskussionsfreudigkeit und ganz besonders für seine Unterstützung bei den Messreisen nach Grenoble.
- Ein besonderer Dank geht an „meinen“ Diplomanden Herrn PHILIPP REISCHAUER, der mich im Rahmen seiner Diplomarbeit bei der Auswertung der Mehrstrahlfälle sehr unterstützt hat.
- Herrn DR. PETER KÄCKELL danke ich für die *ab-initio* Berechnungen der Relaxationsparameter im Rahmen seiner Doktorarbeit am Institut für Festkörpertheorie und Theoretische Optik und für die gute Zusammenarbeit beim Schreiben einer gemeinsamen Veröffentlichung. Außerdem danke ich ihm herzlich für das Korrekturlesen dieser Arbeit.
- Frau BETTINA WUNDERLICH und Herrn DR. GÜNTER HESS danke ich für ihre Hilfe bei der Durchführung der Messungen an der ESRF in Grenoble.
- Herrn FRANK WUNDERLICH danke ich für die Durchführung von hochpräzisen Gitterkonstantenmessungen der Polytypen 15R- und 21R-SiC an der JARD-Apparatur.
- Frau RENATE NEITZEL danke ich für die anregenden Unterhaltungen bei der alltäglichen Kaffeerrunde.
- Herrn DR. GISBERT HÖLZER, Frau DR. ORTRUD WEHRHAHN und Herrn DR. RANDOLF BUTZBACH von der benachbarten Abteilung Röntgenoptik danke ich für vielfältige Hilfestellungen im Bereich der Dynamischen Theorie, der Kristallographie und der Computertechnik.

- Herrn Prof. DR. FRIEDHELM BECHSTEDT und Herrn DR. JÜRGEN FURTHMÜLLER vom Institut für Festkörpertheorie und Theoretische Optik für die *ab-initio* Berechnungen der Relaxationsparameter.
- Herrn DR. BERND SCHRÖTER vom Institut für Festkörperphysik danke ich für die Bereitstellung von Siliziumkarbidproben und die Durchführung der Polaritätsbestimmung an verschiedenen Siliziumkarbidkristallen.
- Herrn DAVID OBERSCHMIDT fühle ich mich zu besonderem Dank verpflichtet für seine Anregungen und die vielen interessanten Gespräche während unserer gemeinsamen Zeit am IOQ in Jena.
- Herrn DR. STEFAN NIEDERMEIER danke ich besonders für seine stete Hilfsbereitschaft in allen Dingen.
- Ein besonderer herzlicher Dank geht an Herrn DR. JÜRGEN HÄRTWIG von der ID19 an der ESRF für die Bereitstellung von Messzeit an seiner *Beamline* und die Einführung in die ESRF.
- Herrn DR. FRANK HEYROTH und Herrn DILEK ALTIN möchte ich für die Unterstützung und Betreuung der Messungen an der *Beamline* ID19 der ESRF danken.
- Herrn DR. ECKART WECKERT danke ich für die Bereitstellung der Programme „multi“ und „dreist“ zur Simulation von Mehrstrahlfällen nach der Dynamischen Theorie.
- Herrn DR. HOLGER BREHM danke ich für die vielfältige Unterstützung bei Problemen und Fragen zu dem Programm „*Mathematica*“.
- Herrn DR. WOLFGANG MATZ, Herrn DR. FRANK EICHORN und Herrn UDO STRAUCH vom Forschungszentrum Rossendorf danke ich für die Bereitstellung von Messzeit an der ROBL *Beamline* an der ESRF und der Unterstützung bei der Durchführung von Messungen an dieser *Beamline*. Ohne diese Hilfe wäre diese Arbeit in der vorliegenden Form nicht entstanden. Herrn DR. NORBERT SCHELL bin ich zu Dank verpflichtet für die Unterstützung vor Ort in Grenoble.
- Ein spezieller Dank geht an CHRISTIAN MANKE vom Lehrstuhl für Angewandte Physik der Universität Erlangen-Nürnberg.
- Der DEUTSCHEN FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT, die im Rahmen des Sonderforschungsbereiches „Physik und Chemie optischer Schichten“ diese Arbeit finanziell unterstützt hat (Teilprojekt A11).
- und schließlich danke ich BIRGITTA.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich, Diplom Physiker (Universität) Andreas Bauer, erkläre hiermit ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Bei der Auswahl und Auswertung folgenden Materials haben mir die nachstehend aufgeführten Personen in der jeweils beschriebenen Weise unentgeltlich geholfen:

1. Prof. Dr. K. Goetz:
Vorgabe des Arbeitsthemas und Diskussion des inhaltlichen Schwerpunktes.
2. P. Reischauer:
Beteiligung an der Auswertung der Mehrstrahlfälle im Rahmen seiner Diplomarbeit.
3. Dr. G. Hess, Dr. J. Kräußlich, B. Wunderlich, F. Wunderlich:
Messung der Gitterparameter und Unterstützung bei den Messungen an der ESRF.
4. Dr. J. Härtwig, Dr. W. Matz:
Bereitstellung von Messzeit an der ESRF.

Weitere Personen waren an der inhaltlich-materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die geltende Promotionsordnung der Physikalisch-Astronomischen Fakultät der Friedrich-Schiller-Universität zu Jena ist mir bekannt.

Ich versichere ehrenwörtlich, dass ich nach bestem Wissen die Wahrheit niedergeschrieben und nichts weggelassen habe.

Fürth, den 26. Juni 2003

Lebenslauf

Name: Andreas Bauer

Geburtstag: 17. November 1968

Geburtsort: Schweinfurt

1980 – 1989	Walther-Rathenau-Gymnasium Schweinfurt, Abschluss mit Abitur
1990 – 1996	Studium der Physik an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Abschluss mit Diplom
1996 – 2000	wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Friedrich-Schiller-Universität Jena
2000 – 2003	wissenschaftlicher Mitarbeiter an der ROBL-Beamline an der ESRF in Grenoble/Frankreich